SÉRIE A, N° 3822
N° D'ORDRE :
4673

THÈSES

PRÉSENTÉES

A LA FACULTÉ DES SCIENCES
de l'Université de PARIS

POUR OBTENIR

LE GRADE DE DOCTEUR ÈS SCIENCES PHYSIQUES

PAR

Daniel SAINT-JAMES

PREMIÈRE THÈSE

ÉTUDE THÉORIQUE DE LA DIFFUSION PARAMAGNÉTIQUE DES NEUTRONS

DEUXIÈME THÈSE

Propositions données par la Faculté

Soutenues le 1er Février 1962 devant la Commission d'examen

MM. F. PERRIN — Président

J. FRIEDEL, P. G. DE GENNES — Examinateurs

SÉRIE A, N° 3822
N° D'ORDRE :
4673

THÈSES

PRÉSENTÉES

A LA FACULTÉ DES SCIENCES
de l'Université de PARIS

POUR OBTENIR

LE GRADE DE DOCTEUR ÈS SCIENCES PHYSIQUES

PAR

Daniel SAINT-JAMES

PREMIÈRE THÈSE

ÉTUDE THÉORIQUE DE LA DIFFUSION PARAMAGNÉTIQUE DES NEUTRONS

DEUXIÈME THÈSE

Propositions données par la Faculté

Soutenues le 1er Février 1962 devant la Commission d'examen

MM. F. PERRIN — Président

J. FRIEDEL, P. G. DE GENNES — Examinateurs

FACULTÉ DES SCIENCES DE L'UNIVERSITÉ DE PARIS

PROFESSEURS

Doyen ..... ZAMANSKY

G. JULIA	T Analyse supérieure et Algèbre supérieure
DE BROGLIE	T Théories physiques
PRENANT	T Anatomie et histol. comparés
PERES	T Mécanique des fluides et applications
BOURCART	T Géogr. physique et Géol. dynamique
PLANTEFOL	T Botanique
GRASSE	T Evolution des êtres organisés
PREVOST	T Chimie organique
BOULIGAND	T Analyse appliquée à la Géométrie
CHAUDRON	T Chimie appliquée
WYART	T Minéralogie et Cristallogr.
TEISSIER	T Zoologie
MANGENOT	T Biologie végétale (Orsay)
P. AUGER	T Physique quantique et relativité
MONNIER	T Physiologie des Fonctions
PIVETEAU	T Paléontologie
ROCARD	T Physique (E.N.S.)
CARTAN	T Mathématiques (E.N.S.)
LAFFITTE	T Chimie Générale
FAVARD	T Géométrie supérieure
COULOMB	T Physique du Globe
Mlle COUSIN	T Biologie
CHRETIEN	T Chimie minérale
DRACH	T Zoologie
KASTLER	T Physique (E.N.S.)
EPHRUSSI	T Génétique
RIVIERE	T Géologie (Orsay)
GAUTHERET	T Biologie (PCB)
R. LUCAS	T Recherches Physiques
A. THOMAS	T Biol. cellulaire
ARNULF	T Optique appliquée
M. MORAND	T Physique Enseignement
SOLEILLET	T Physique (P.C.B.)
FORTIER	T Mécanique expérimentale des fluides
DANJON	T Astronomie
PETIT	T Biologie maritime
QUENEY	T Météorologie et dynamique atmosphérique
GALLIEN	T Embryologie
EICHHORN	T Biologie végétale (P.C.B.)
DE CUGNAC	T Biologie végétale (S.P.C.N.)
Mlle CAUCHOIS	T Chimie Physique
THELLIER	T Physique du Globe
L'HERITIER	T Biologie Générale (Orsay)
GRIVET	T Radioélectricité (Orsay)
PONCIN	T Mécanique générale
DUBREIL	T Arithmétique et théorie des nombres
QUELET	T Chimie organique
CAGNIARD	T Géophysique appliquée
CHAMPETIER	T Chimie macromolécul.
CUVILLIER	T Micropaléontologie
JUNG	T Pétrographie
TRILLAT	T Microscopie et diffract. électronique
WIEMANN	T Chimie organique et structurale
JACQUINOT	T Spectroscopie (Orsay)
VASSY	T Physique de l'atmosphère
DESTOUCHES	T Théories physiques
PRUVOST	T Géologie
AMIEL	T Chimie des solides
HOCART	T Minéralogie et Cristallogr.
J.P. MATHIEU	T Recherches Physiques
COUTEAUX	T Biol. animale (PCB)
MAY	T Zoologie (Orsay)
CHOQUET	T Théor. des fonctions et Topologie
FELDMANN	T Biol. végétale (P.C.B.)
GUINIER	T Physique des solides (Orsay)
JOST	T Physiologie comparée
FORTET	T Calcul des Probabilités
SCHWARTZ	T Calc. diff. et Intégr.
CHOUARD	T Physiologie végétale
MALAVARD	T Aviation (Techn. Aéronaut.)
BRELOT	T Calcul différentiel
NORMANT	T Synthèse organique générale
BENARD	T Chimie (E.N.S.C.P.)
BUVAT	T Botanique (E.N.S.)
DUGUE	T Statistiques mathém.
SOULAIRAC	T Psychophysiologie
ULRICH	T Physiologie végétale (E.N.S.)
MARECHAL	T Optique théorique et appliquée
KIRRMANN	T Théories chimiques
CHADEFAUD	T Botanique
Mlle LE BRETON	T Physiologie
SALEM	T Mathématiques générales
LELONG	T Mathématiques générales
DEVILLERS	T Anatomie et Histol. comparées
EHRESMANN	T Topologie algébrique
FRANÇON	T Physique (S.P.C.N.)
GLANGEAUD	T Géogr. physique et Géologie dynamique
GODEMENT	T Mathématiques (M.P.C.)
PISOT	T Calcul des Probabilités
ROCH	T Géologie
SCHATZMANN	T Astrophysique
TERMIER	T Paléontologie stratigraphique
ZAMANSKY	T Mathématiques générales
LENNUIER	T Physique (P.C.B.)
RIZET	T Génétique (Orsay)
ROUTHIER	T Géologie appliquée
Mme TONNELAT	T Relativité
DIXMIER	T Mathématiques (MPC)
SOUCHAY	T Chimie (P.C.B.)
AIGRAIN	T Electrotechn. générale
BRUSSET	Chimie minérale
M. LEVY	T Physique théorique des hautes énergies (Orsay)

R. UNIV.
BIBLIOTHEEK
LEIDEN

Mme CHAIX	T Chimie biologique
Mme HUREL-PY	Biol. vég. (P.C.B.)
PIAUX	T Chimie (S.P.C.N.)
BRUN	T Mécanique exper. des Fluides
LEDERER	T Chimie biologique
Mme DUBREIL	T Mathématiques (Agrég.)
Mme LELONG	T Mathem. (E.N.S.)
BELLAIR	T Géologie (S.P.C.N.)
COTTE	T Physique (M.P.C.)
DUBOIS J.E.	T Chimie (M.P.C.)
LAMOTTE	T Zoologie (E.N.S.)
MICHEL André	T Chimie Minérale (Orsay)
OLMER	T Energétique G^le
ROUAULT	T Physique
GAUTHIER	T Mécanique appliquée
BARCHEWITZ	T Chimie Physique
BROSSEL	T Physique atomique
BUSER	Biologie animale (P.C.B.)
CAMUS	Biologie végétale (P.C.B.)
CASTAING	T Physique (Orsay)
CURIEN	T Minéralogie et cristallographie
MOYSE	T Physiol. Vég. (Orsay)
PANNETIER	T Chimie (Orsay)
POSSOMPES	T Biologie animale (P.C.B.)
PULLMANN	Chimie théorique
TEILLAC	T Physique nucléaire et radioactivité
TONNELAT	Biol. physico-chimique
VILLE	T Econométrie
WILLEMART	Chimie (P.C.B.)
DODE	T Chimie (Orsay)
FREYMANN	T Physique (S.P.C.N.)
GUINOCHET	T Biol. Vég. (Orsay)
ROLLET	T Chimie (P.C.B.)
Mlle JOSIEN	T Chimie (P.C.B.)
CHEVALLEY	T Géométrie algébrique et théorie des groupes
ARNOULT	T Electronique (Orsay)
CHAPELLE	T Physique (Orsay)
DELANGE	T Mathématiques (Orsay)
DENY	T Mathématiques générales (Orsay)
GERMAIN	T Mécanique théorique des fluides
LUCAS G.	T Géologique
ALLARD	T Chimie Physique
BERTHELOT	T Physique fondamentale des Hautes Energies (Orsay)
BRICARD	T Météorologie
Mme ALBE-FESSARD	Psychophysiol.
FRIEDEL	Physique des Solides (Orsay)
M. JULIA	Chimie Organ. Structurale
LENDER	Biol. Animale (S.P.C.N.) (Orsay)
MAGAT	Physico-chimie des Rayonnements
Mlle QUINTIN	T Electrochimie
MONOD	T Biochimie cellulaire
BENOIT	T Physiologie animale (Orsay)
DE POSSEL	T Analyse numérique
CHARLOT	T Chimie analytique
HAISSINSKY	T Radiochimie
LEMEE	T Physiologie B.M.P.V. (Orsay)
GUERIN	T Chimie (Orsay)
CHATELET M.	Chimie (P.C.B.)
JEAN	Physique (Orsay)
MATTLER	T Physique (Orsay)
MICHEL (Louis)	Physique théorique (Orsay)
RUMPF	Chimie (P.C.B.)
BERGERARD	Biol. Anim. (S.P.C.N.)(Orsay)
BERTEIN	Electronique (Orsay)
BOUISSIERES	Chimie des Radioéléments (Orsay)
Mme COUTURE	Thermodynamique et Mécanique Physique
ELLENBERGER	Géologie appliquée
FRANC	Biologie animale (P.C.B.)
SCHNELL	Botanique tropicale (Orsay)
STOLKOWSKI	Physiologie animale (P.C.B.)
ACHER	Chimie Biologique (Orsay)
BAUDOIN	Biologie
BEAUMONT	Biologie animale
BLAMONT	Géophysique Ionosphère
BOURREAU	Biologie Végétale S.P.C.N. (Orsay)
CURIE D.	Physique (M.G.P.)
DURAND-DELGA	Géologie
FREON	Chimie Organique (Orsay)
HELLER	Physiologie végétale
TORTRAT	Calcul des Probabilités
CAILLEUX	Géologie (S.P.C.N.)
MAGNAN	T Physique (P.C.B.)
DAUDEL	Mécanique Ondulatoire appliquée à la chimie théorique et à la Physique Nucléaire
Mlle FOURCROY	Biologie Végétale (S.P.C.N.)
BARRAUD	Physiologie Cellulaire
NOIROT	Evolution des êtres organisés
Mme FOURES-BRUHAT	T Mécan. Analytique et Mécanique céleste
Mlle VEIL	Physiologie Générale
LWOFF	T Microbiologie
SIESTRUNCK	T Mécanique physique et Expérimentale
LACOMBE	T Métallurgie (Orsay)
BROCHARD	T Physique P.C.B. (Orsay)
CABANNES	T Mécanique générale
LESIEUR	T Mathématiques M.P.C. (Orsay)
MAZET	T Mécanique générale (Orsay)

Secrétaire général ..... R. POULLAIN

INTRODUCTION

L'apparition des piles atomiques a fourni aux physiciens des sources de neutrons importantes. Dans le domaine plus particulier de la physique du solide, les neutrons lents sont devenus un moyen d'investigation universellement adopté.

Pour des neutrons voisins de l'énergie dite "thermique", la longueur d'onde équivalente est de l'ordre de l'angström. On conçoit que, par leur canal, il soit possible d'atteindre les propriétés cristallines qui font intervenir des distances de l'ordre de l'angström, et dont l'étude était réservée, jusqu'ici, aux spécialistes des rayons X.

Mais si les neutrons se bornaient à n'être qu'une démarcation des rayons X, leur intérêt serait très faible, surtout eu égard aux frais considérables de mise en œuvre.

Fort heureusement le neutron est sensible à la fois à l'action du noyau et à celle des électrons de l'atome :

- sensible à l'action du noyau, et ces propriétés nucléaires, qui n'ont aucune raison d'être fonction du numéro atomique, permettent les études de composés où deux atomes sont trop voisins pour être différenciés par l'intermédiaire des rayons X (par exemple dans le cas des transformations ordre-désordre de certains alliages).

- sensible à l'action des électrons, et cette propriété magnétique, que les rayons X ne connaissent pas, est à l'origine de la détermination des structures magnétiques de nombreux composés, voire de la découverte de nouveaux types d'arrangements magnétiques.

La littérature de cette dernière décennie foisonne en déterminations de cette sorte.

Concurremment à ces études qui utilisent une diffusion sans changement d'énergie du neutron (élastique) régie par la loi de Bragg :

$$\lambda = 2 d \sin \vartheta$$

se sont développées des recherches basées sur la diffusion inélastique.

Leur intérêt principal réside souvent dans le fait qu'une variation d'énergie du neutron de l'ordre de son énergie incidente entraîne une variation de longueur d'onde très appréciable selon la relation de conservation :

$$\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{4\pi^2}{\lambda_o^2} - \frac{4\pi^2}{\lambda_f^2}\right) = \Delta E .$$

Cette propriété, tout à fait remarquable, permet des déterminations analogues à celles faites par la diffusion inélastique des rayons X, mais sans que l'on soit tributaire d'une formule de section efficace. En effet une telle formule était nécessaire pour ceux-ci puisque, pour les variations d'énergie que nous envisageons ($\Delta E \leqslant 0,1$ eV), la variation de longueur d'onde est inappréciable. Pour les neutrons au contraire, cette variation est de l'ordre de l'angström, et si l'on étudie une transition entre deux niveaux discrets d'un atome ou d'un cristal, le résultat se traduira par l'apparition de pics bien séparés, se détachant sur un fond continu (exemple : étude du spectre de vibration thermique d'un solide).

A côté de ces phénomènes, que nous pourrions qualifier de "tranchés", il en existe de "diffus" qui se traduisent par un élargissement de la raie incidente (exemple : étude de l'opalescence critique magnétique, etc.).

Nous n'avons pas l'intention de faire un historique de l'utilisation des neutrons en physique du solide, mais d'en rappeler les grandes lignes et d'introduire l'étude d'un nouveau champ d'application qui s'apparente à celui de la spectroscopie.

C'est encore les propriétés magnétiques du neutron qui sont d'intérêt ici, mais utilisées dans le domaine des diffusions inélastiques "tranchées". Un ion magnétique possède une couche électronique incomplète d'où proviennent ces propriétés. Si le couplage Russell - Saunders existe (et nous nous bornerons à ce cas), nous pourrons définir un terme spectroscopique L S. Les méthodes de la spectroscopie permettent d'étudier des transitions entre les divers états de tels ions, mais, en général, à la condition qu'elles correspondent à des distances de l'ordre de 1000 cm^{-1} et plus. Les neutrons nous permettront d'envisager des phénomènes plus fins où ces distances sont de l'ordre de la centaine de cm^{-1}.

A titre d'exemple, et pour choisir les cas plus particulièrement envisagés au cours de ce travail, considérons les ions magnétiques soit de la série des terres rares soit du groupe du fer.

Pour les premiers, en plus du couplage Russell-Saunders, existe le couplage spin-orbite, insuffisant pour briser le premier, mais qui lève la dégénérescence

$$(2L + 1)(2S + 1)$$

en niveaux de $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$ successifs, dont les distances sont généralement de l'ordre de 1000 cm^{-1} et plus (sauf pour les deux exceptions du samarium et de l'europium), et que l'on étudie par les méthodes spectroscopiques ordinaires. Placés dans un environnement cristallin tel que l'interaction magnétique entre les ions soit petite (le composé est paramagnétique) la dégénérescence du niveau fondamental est levée par les interactions cristallines des ions non magnétiques. On peut calculer l'ordre de grandeur de séparation des sous-niveaux ainsi obtenus en supposant que l'interaction peut être représentée par un champ cristallin électrostatique moyen, et on trouve qu'il est en général de l'ordre de la centaine de cm^{-1}. On peut espérer induire des transitions entre ces sous-niveaux par diffusion inélastique des neutrons.

Dans le cas du groupe du fer la situation est inverse. La composante de symétrie cubique du champ cristallin lève la dégénérescence

$$(2L + 1)$$

et fournit un état fondamental orbital, qu'une composante de symétrie moindre du champ cristallin peut séparer en sous-niveaux, cet effet pouvant être également obtenu grâce à l'interaction spin-orbite si le moment orbital n'est pas bloqué (au premier ordre tout du moins). Là aussi, les séparations des sous-niveaux sont de l'ordre de la centaine de cm^{-1}.

Ce qui précède nous amène naturellement à donner le plan du travail que nous présentons.

Dans une première partie, nous réétablissons les formules générales de la diffusion paramagnétique des neutrons en supposant uniquement que les ions magnétiques obéissent au couplage Russell-Saunders et à la règle de Hund.

Les résultats de cette section sont appliqués dans la deuxième partie au cas des terres rares et dans la troisième au cas du groupe du fer. Bien que les sections efficaces ne soient pas fondamentalement nécessaires, nous les avons calculées pour montrer que la détection de tels effets était possible. Nous en avons profité pour examiner et discuter la valeur de la détermination expérimentale par Koehler et Wollan des rayons des couches 4f des terres rares. Cette détermination reposait, en effet, sur l'hypothèse que les effets du champ cristallin sur le fondamental J sont négligeables. Nous avons pu montrer que bien que cela ne soit pas le cas, leur détermination est cependant exacte.

Enfin dans la quatrième et dernière partie, nous étudions l'effet de l'échange entre ions magnétiques. La largeur de raie due à ce phénomène est étudiée ; sa valeur et sa variation en fonction du vecteur de diffusion sont comparées aux résultats d'une étude analogue faite par P.G. de Gennes dans le cas d'un paramagnétique non soumis à des interactions cristallines.

CHAPITRE I

DIFFUSION PARAMAGNÉTIQUE DES NEUTRONS

Résumé :

Les formules de base, utilisées dans la diffusion paramagnétique des neutrons, sont appliquées ici au cas où le moment orbital des ions magnétiques ne peut plus être considéré comme bloqué . Le cas envisagé est celui où les ions magnétiques ne subissent aucune interaction d'échange, mais peuvent subir des interactions (d'origine cristalline par exemple) qui ne rompent pas le couplage Russell-Saunders mais peuvent lever la dégénérescence du niveau fondamental de l'ion libre. Il est possible de déterminer la section efficace correspondant à une transition entre deux des sous-niveaux formés ; on en donne l'expression générale.

Dans tout ce qui suit nous réexposons et généralisons, à l'aide d'une méthode originale, le calcul, exposé d'abord par G. Trammell [1] puis repris par S. Odiot et D. Saint-James [2], des sections efficaces des neutrons pour une diffusion paramagnétique en l'absence de blocage du moment orbital. Nous traitons le cas le plus général où les états des ions magnétiques ne peuvent plus être définis à partir d'un seul nombre quantique J.

I - ETATS DES IONS MAGNETIQUES -

Nous allons admettre qu'aucune des interactions auxquelles sont soumis les ions magnétiques n'est suffisante pour rompre le couplage Russell-Saunders et que de plus la règle de Hund est satisfaite.

Compte tenu du principe d'exclusion de Pauli, nous pouvons alors définir un terme spectroscopique, repéré par les deux nombres quantiques :

$$L = \sum_n l_n$$

$$S = \sum_n s_n$$

respectivement moment orbital total et spin total de l'ion considéré. Les sommes sont étendues à tous les électrons de la couche incomplète i de cet ion.

Pour les n électrons de cette couche la fonction d'onde d'un état α sera prise sous la forme :

$$\Psi_\alpha = \Phi_i(r_1, r_2, \dots r_n)\Theta_{i,s,L,S,\alpha} \qquad (1\text{-}1)$$

expression où $\Theta_{i,s,L,S,\alpha}$ représente un "état angulaire", qui, pour une interaction quelconque respectant le couplage Russell-Saunders, pourra toujours être écrit :

$$\Theta_{i,s,L,S,\alpha} = \sum_{L_z S_z} A^{\alpha}_{L_z S_z} |L\ L_z\rangle |S\ S_z\rangle. \qquad (1\text{-}1a)$$

La fonction radiale $\Phi_i(\vec{r})$ sera prise identique pour chaque électron [1]. (Nous en donnerons la forme explicite pour chaque cas considéré ultérieurement. Voir infra Ch. II et III).

---

(1) C'est-à-dire que nous adopterons une approximation à un électron. La fonction d'onde $\Phi_i(\vec{r})$ ne dépendra que d'une seule coordonnée.

Pour des raisons qui apparaîtront plus clairement par la suite et qui sont liées à l'obtention d'une forme simple du facteur de forme, nous pourrons toujours écrire :

$$\Theta_{l,s,L,S,\alpha} = \sum_{J,M} A^{\alpha}_{M,J} \mid JM > \qquad (1\text{-}1b)$$

expression où la somme est étendue à tous les moments angulaires que l'on peut former par addition de L et de S

$$| L - S | \leqslant J \leqslant L + S$$

et à toutes les valeurs de $M = J_z$

$$- J \leqslant M \leqslant J .$$

Les coefficients A^{α}_{JM} s'obtiennent aisément à partir de l'équation (1-1a) en utilisant les coefficients de Clebsch-Gordon appropriés.

II - FORMULES GENERALES DE LA DIFFUSION PARAMAGNETIQUE DES NEUTRONS -

Un neutron rencontrant un atome subit l'action :

a) du noyau

b) des électrons non appariés.

Pour les ions magnétiques usuels, les sections efficaces de ces deux effets sont du même ordre de grandeur. Si les neutrons ne sont pas polarisés (et c'est le cas auquel nous nous bornerons au cours de ce travail) les deux actions contribuent indépendamment. Il est fréquemment possible de mesurer, avec une bonne précision, la partie électronique de la diffusion en retranchant de la section efficace totale la partie purement nucléaire qui est en général connue pour les neutrons de basse énergie.

De plus, pour certaines des déterminations qui nous intéressent plus spécialement ici, une connaissance en valeur absolue de la section efficace n'est pas nécessaire. En effet nous allons nous attacher à l'étude de transitions induites par le neutron entre deux états possibles de l'ion magnétique E_o et E_f. Le neutron subissant une diffusion inélastique, où l'énergie doit être conservée, c'est-à-dire telle que :

$$\pm \frac{\hbar^2}{2M_N} (p_o^2 - p_f^2) = E_f - E_o \qquad (1\text{-}2)$$

où p_o et p_f sont les nombres d'onde du neutron de masse M_N avant et après la collision. Cette variation d'énergie du neutron fera apparaître des "pics" de section efficace qui se détacheront sur un fond continu dû aux autres interactions, pics que, par une géométrie appropriée, ou par un choix judicieux de l'énergie des neutrons incidents, on tentera de séparer des autres pics possibles (diffusion de Bragg, diffusion inélastique due aux phonons...).

C'est le calcul quantitatif de la diffusion des neutrons par des ions magnétiques dont les états peuvent être caractérisés par les équations (1-1) que nous allons exposer. Cette diffusion pourra comporter des phénomènes de diffusion inélastique comme ceux que nous venons de mentionner .

Le principe de ce calcul a été donné par O. Halpern et P. Johnson [3] et appliqué par eux au cas où le moment orbital peut être considéré comme bloqué.

Nous prendrons dans le hamiltonien le terme qui décrit l'interaction des neutrons avec les électrons non appariés de l'atome sous une des formes données par ces auteurs (Cf. eq. 2.20 de leur article) et qui décrit le comportement des électrons dans le champ créé par le neutron :

$$H_{int} = - \frac{e}{c} \sum_n \vec{\alpha}_n . A_N(\vec{r}_n - \vec{r}_N). \qquad (1\text{-}3)$$

$\vec{\alpha}_n$ est l'opérateur vitesse de Dirac pour le n-ième électron dont la position est $\vec{r}_n$, $\vec{r}_N$ repère la position du neutron. $A_N(\vec{r}) = g_N \vec{S}_N \times \frac{\vec{r}}{r^3}$ est son potentiel vecteur, S_N son spin, g_N son facteur de Landé (1) et M_N sa masse. e est la charge de l'électron, c est la vitesse de la lumière.

---

(1) $g_N = 1,91 \frac{e}{M_N c}$.

L'équation intégrale de la diffusion nous permet d'écrire la fonction d'onde du neutron comme la somme d'une onde plane et d'une onde sortante :

$$\Phi_N = e^{i\vec{p}_o \cdot \vec{r}_N} - \frac{M_N}{2\pi} \int \frac{e^{ip|\vec{r}_N - \vec{r}'_N|}}{|\vec{r}_N - \vec{r}'_N|} H_{int}(\vec{r}'_N)\ \Phi_N(\vec{r}'_N)\ d\vec{r}'_N$$

A l'approximation de Born, qui consiste essentiellement à remplacer dans l'intégrale $\Phi_N(\vec{r}')$ par l'onde plane $e^{i\vec{p}_o \cdot \vec{r}'}$, l'onde sortante du système pourra être écrite :

$$\Psi_s = \frac{M_N e\, g_N}{2\pi c} \sum_f < \chi_f\, \Psi_f \Big| \int \sum_n \vec{S}_N \times \frac{(\vec{r}'_N - \vec{r}_n)}{|\vec{r}'_N - \vec{r}_n|^3} \cdot \vec{\alpha}_n \ \frac{e^{ip_f|\vec{r}_N - \vec{r}'_N|}}{|\vec{r}_N - \vec{r}'_N|} e^{i\vec{p}_o \cdot \vec{r}'_N} \cdot$$

$$\cdot\ d\vec{r}'_N \,|\, \chi_o \Psi_o > \chi_f \Psi_f \qquad (1\text{-}4a)$$

Ψ_i est une fonction propre d'énergie E_i de l'atome, χ représente l'état de spin du neutron d'impulsion $\hbar p$, les indices o et f distinguent les quantités avant et après la collision. La sommation doit être étendue à toutes les voies possibles c'est-à-dire à tous les états possibles de l'atome compatibles avec l'équation de conservation de l'énergie (1-2).

A grande distance la fonction de Green intervenant dans l'expression (1-4a) peut être développée et après une intégration classique il vient :

$$\Psi_s = \frac{i M_N e\, g_N}{c} \sum_f < \chi_f\, \Psi_f | \vec{S}_N \cdot \left(\frac{\vec{k}}{k^2} \times \sum_n \vec{\alpha}_n\, e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}_n} \right) | \chi_o \Psi_o > \frac{\chi_f\, \Psi_f\, e^{ip_f r_N}}{r_N} \qquad (1\text{-}4b)$$

$\vec{k} = \vec{p}_f - \vec{p}_o$ est le vecteur de diffusion.

Il s'agit maintenant de transformer l'expression de l'amplitude de diffusion :

$$a_f \simeq < \chi_f\, \Psi_f | \vec{S}_N \cdot \left(\frac{\vec{k}}{k^2} \times \sum_n \vec{\alpha}_n\, e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}_n} \right) | \chi_o \Psi_o >$$

et nous allons, comme il est d'usage, utiliser l'approximation non-relativiste de Pauli. Considérons le vecteur courant :

$$i\vec{J}_{f,o}(\vec{k}) = i\,\frac{e}{c} < \Psi_f | \sum_n \vec{\alpha}_n\, e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}_n} | \Psi_o >$$

A l'approximation de Pauli, qui consiste en une réduction aux grandes composantes de l'équation de Dirac, l'opérateur $\vec{\alpha}$ peut être remplacé par :

$$\frac{1}{2m} [\, \vec{\sigma}(\vec{\sigma} \cdot \vec{p}) + (\vec{p} \cdot \vec{\sigma})\vec{\sigma}\,]$$

où m est la masse de l'électron d'impulsion $\vec{p}$ et $\vec{\sigma}$ la matrice de Pauli. Le vecteur courant devient :

$$i\vec{J}_{f,o}(\vec{k}) = \frac{ie}{2mc} < \Psi_f | \sum_n \left(e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}_n} \vec{\sigma}_n (\vec{\sigma}_n \cdot \vec{p}_n) + (\vec{p}_n \cdot \vec{\sigma}_n)\vec{\sigma}_n e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}_n} \right) | \Psi_o >$$

C'est-à-dire :

$$i\vec{J}_{f,o}(\vec{k}) = \frac{ie}{2mc} < \Psi_f | \sum_n e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}_n} \vec{p}_n + \sum_n \vec{p}_n\, e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}_n} + i \sum_n (\vec{p}_n \times \vec{\sigma}_n)\, e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}_n} | \Psi_o >$$

$$= \frac{ie}{2mc} < \Psi_f | \sum_n e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}_n} \vec{p}_n + \sum_n \vec{p}_n\, e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}_n} + 2i\vec{k} \times \vec{s}_n\, e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}_n} | \Psi_o > \qquad (1\text{-}5)$$

Deux termes apparaissent dans le courant :

- un terme de courant de spin :

$$< \Psi_f | 2i\vec{k} \times \vec{s}_n\, e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}_n} | \Psi_o >,$$

- un terme de courant orbital :

$$< \Psi_f \left| \sum_n \vec{p}_n \, e^{i\vec{k}.\vec{r}_n} + \sum_n e^{i\vec{k}.\vec{r}_n} \vec{p}_n \right| \Psi_o > ;$$

c'est la présence de ce terme qui oblige à reprendre totalement le traitement de Halpern et Johnson [1].

Ce terme peut être écrit sous une autre forme en développant l'exponentielle en puissances successives de $i\vec{k}.\vec{r}_n$ et en appliquant les règles de commutation de $\vec{p}_n$ avec $\vec{r}_n$. Il vient [2] :

$$\vec{p}\, e^{i\vec{k}.\vec{r}} + e^{i\vec{k}.\vec{r}}\, \vec{p} = \frac{2mi}{\hbar} \left[H, \vec{r}(i\vec{k}.\vec{r})^{-1} (e^{i\vec{k}.\vec{r}} - 1) \right] - i\vec{k} \times \left[\frac{1}{2} \vec{l}\, f(\vec{k}.\vec{r}) + \frac{1}{2} f(\vec{k}.\vec{r})\, \vec{l} \right] \qquad (1\text{-}6)$$

expression où H est le hamiltonien des électrons atomiques, $f(\vec{k}.\vec{r})$ une fonction définie par :

$$f(\vec{k}.\vec{r}) = 2 \sum_{p=o}^{\infty} \frac{i(\vec{k}.\vec{r})^p}{p!\,(p+2)} = \frac{2}{(i\vec{k}.\vec{r})^2} \int_o^{i\vec{k}.\vec{r}} x\, e^x\, dx \qquad (1\text{-}7)$$

et où :

$$\vec{l} = \vec{r} \times \vec{p}$$

Le vecteur courant devient alors :

$$i\vec{J}_{f,o}(\vec{k}) = \vec{k} \frac{e}{2mc} \times < \Psi_f \left| \sum_n \left\{ \frac{1}{2} \vec{l}_n f(\vec{k}.\vec{r}_n) + \frac{1}{2} f(\vec{k}.\vec{r}_n)\, \vec{l}_n + 2\vec{s}_n e^{i\vec{k}.\vec{r}_n} \right\} \right| \Psi_o >$$

$$- \frac{e}{c} \frac{E_f - E_o}{\hbar} < \Psi_f \left| \sum_n \vec{r}_n (i\vec{k}.\vec{r}_n)^{-1} (e^{i\vec{k}.\vec{r}_n} - 1) \right| \Psi_o >$$

La deuxième somme ne contribue pas pour $E_f = E_o$ (choc élastique) ; on pourra toujours la négliger pour des neutrons lents où les énergies mises en jeu sont de l'ordre de 0,1 eV.

Nous prendrons donc le vecteur courant sous la forme :

$$i\vec{J}_{f,o}(\vec{k}) = \vec{k} \frac{e}{2mc} \times < \Psi_f \left| \sum_n \left\{ \frac{1}{2} \vec{l}_n f(\vec{k}.\vec{r}_n) + \frac{1}{2} f(\vec{k}.\vec{r}_n)\, \vec{l}_n + 2\vec{s}_n e^{i\vec{k}.\vec{r}_n} \right\} \right| \Psi_o > \qquad (1\text{-}8)$$

En reportant dans l'équation (1-4) il vient :

$$\Psi_S = \sum_f a_f \frac{e^{ip_f r_N}}{r_N}$$

$$a_f = \frac{e M_N g_N}{2mc} < \chi_f \Psi_f \left| S_N^+ P^- + S_N^- P^+ \right| \chi_o \Psi_o > \qquad (1\text{-}9)$$

est l'amplitude de diffusion [3]

où $\vec{P}$ est l'opérateur :

$$\vec{P} = \sum_n \left\{ \frac{1}{2} (\vec{l}_n f(\vec{k}.\vec{r}_n) + f(\vec{k}.\vec{r}_n)\vec{l}_n) + 2\vec{s}_n e^{i\vec{k}.\vec{r}_n} \right\} \qquad (1\text{-}10)$$

généralisation de l'opérateur utilisé dans le cas où l'on ne fait pas intervenir le moment orbital. $P_\pm$ et $S_\pm$ sont définis par rapport à la direction de $\vec{k}$ prise comme axe des z avec la convention habituelle :

$$A_\pm = A_x \pm i A_y$$

---

(1) L'équation (4-02) de leur article équivaut à l'expression (1-5) où l'on annule le terme de courant orbital.

(2) Il est inutile de reproduire ici les longs et ennuyeux calculs, mais sans réelle difficulté, qui mènent à l'équation (1-6). Signalons toutefois que Trammel donne de la formule (1-6) une élégante démonstration dans le cas où Ψ_o et Ψ_f sont des états de même énergie, c'est-à-dire dans le cas où le premier terme du second membre de (1-6) ne contribue pas. (Cf. Trammel op. cit. Appendice).

(3) Si l'on écrit $S_N^+ P^- + S_N^- P^+$ sous la forme $2\vec{S}_N . \left[\vec{P} - \frac{\vec{k}}{k^2} (\vec{P}.\vec{k}) \right]$ on retrouve l'expression (4-1) de Halpern et Johnson, à l'exception, bien entendu, des termes de courant orbital qui sont contenus dans P).

L'équation (1-10) exprime le fait que, pour une diffusion "S"

$$\vec{S}_N + \sum_n \vec{l}_n + \vec{s}_n$$

est un invariant de collision dans la direction de $\vec{k}$.

On obtiendra alors la section efficace différentielle sous la forme :

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \sum_f \frac{p_f}{p_o} |a_f|^2$$

où p_f/p_o est le facteur de flux ; c'est-à-dire :

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{M_N e g_N}{2mc}\right)^2 \sum_f \frac{p_f}{2p_o} \left\{ |\langle \Psi_f | P_+ | \Psi_o \rangle|^2 + |\langle \Psi_f | P_- | \Psi_o \rangle|^2 \right\} \qquad (1\text{-}11)$$

Remarques : L'équation (1-11) se rapporte à la diffusion par un seul ion d'état initial Ψ_o dans le cas où les neutrons incidents ne sont pas polarisés. Dans les substances où l'effet des forces d'échange agissant entre les couches magnétiques des différents ions est faible, il n'y aura pas de corrélation entre les contributions des divers ions et par conséquent pas de cohérence dans la diffusion magnétique des neutrons. La section efficace totale sera alors donnée par sommation statistique sur tous les états initiaux Ψ_o des ions magnétiques.

III - EVALUATION DES ELEMENTS DE MATRICE DE L'OPERATEUR $\vec{P}$ -

Nous allons maintenant calculer les éléments de matrice de $\vec{P}$ lorsque les fonctions Ψ_o et Ψ_f peuvent être écrites sous la forme (1-1).

Pour simplifier l'écriture nous récrivons l'équation (1-1c) :

$$\Psi_\alpha = \sum_{JM} A^\alpha_{JM} |\gamma JM\rangle_1 \qquad (1\text{-}1d)$$

où γ est un nombre quantique additionnel qui spécifie les conditions radiales des électrons de la couche i. L'indice 1 repère un référentiel attaché à l'ion dans lequel sont quantifiés les états $|JM\rangle$ et dont l'axe des z est en général différent de $\vec{k}$.

La section efficace devient :

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{M_N e g_N}{2mc}\right)^2 \sum_{o,f} \frac{e^{-E_o/k_BT}}{\sum_j e^{-E_j/k_BT}} \frac{p_f}{2p_o}$$

$$\times \left\{ \left| \sum_{M'J'} \sum_{MJ} A^{f\,*}_{J'M'} A^o_{JM} \, {}_1\langle \gamma J'M' | P_+ | \gamma JM \rangle_1 \right|^2 \right.$$

$$\left. + \left| \sum_{M'J'} \sum_{MJ} A^{f\,*}_{J'M'} A^o_{JM} \, {}_1\langle \gamma J'M' | P_- | \gamma JM \rangle_1 \right|^2 \right\} \qquad (1\text{-}12)$$

Pour évaluer ces éléments de matrice nous pourrions, par exemple, exprimer les états $|\gamma JM\rangle_1$ en fonction des états $|\gamma JM\rangle$ pris dans le référentiel de définition de P. (En fait c'est l'opérateur $\vec{P}$ qu'il sera plus avantageux d'amener dans le référentiel 1, mais, comme on le verra, ceci ne change rien à l'argument). Nous serons donc conduits à calculer des éléments de matrice de la forme :

$$\langle \gamma J'M' | \vec{P} | \gamma JM \rangle \qquad (1\text{-}13)$$

où les états et l'opérateur sont définis dans le même référentiel.

Il serait, en principe, possible de calculer directement les éléments de matrice (1-13) en explicitant $\vec{P}$ et $|\gamma JM\rangle$ en opérateurs et états à un seul électron. Mais cette méthode serait vite inextricable (même pour un nombre d'électrons égal à deux!) et ferait perdre l'agréable simplification apportée par le couplage Russell-Saunders et la règle de Hund.

Il est plus élégant de développer $\vec{P}$ en série d'opérateurs tensoriels irréductibles agissant dans le terme L S et dont on pourra calculer les éléments de matrice réduits par une méthode annexe. La simplification proviendra de l'utilisation intensive des propriétés de ces tenseurs dont nous rappelons les plus importantes.

a) Propriétés des opérateurs tensoriels irréductibles [1] :

On sait que dans une rotation des axes, d'angles d'Euler $(\alpha\beta\gamma) = (\omega)$ un harmonique sphérique Y_k^q, ou un état propre $|JM>$, se transforment selon les relations :

$$D(\alpha\beta\gamma)\ Y_k^q = \sum_{q'=-k}^{k} D^k_{q'q}(\omega)\ Y_k^{q'} \tag{1-14}$$

$$D(\alpha\beta\gamma)\,|JM> = \sum_{M'=-J}^{J} D^J_{M'M}(\omega)\,|JM'> \tag{1-15}$$

où $D^k_{q'q}(\omega)$, $D^J_{M'M}(\omega)$ sont des "matrices de rotation" dont les principales propriétés sont bien connues (Cf. Edmonds [4] Ch.IV). La définition des opérateurs tensoriels irréductibles procède d'une généralisation des formules (1-14)(1-15).

On définira, en effet, un opérateur tensoriel irréductible de degré k, $\vec{T}_k$ comme un être mathématique à $(2k + 1)$ composantes T_k^q qui sont des opérateurs tels que, dans une rotation des axes d'angles d'Euler $(\alpha\beta\gamma) = (\omega)$, ils s'échangent entre eux comme les harmoniques sphériques, c'est-à-dire :

$$D(\omega)\ T_k^q\ D^{-1}(\omega) = \sum_{q'=-k}^{k} T_k^{q'} D^k_{q'q}(\omega) \tag{1-16}$$

De cette propriété on déduit :

$$[J_\pm,\ T_k^q] = [(k \mp q)(k \pm q + 1)]^{1/2} T_k^{q\pm1} \tag{1-17a}$$

$$[J_z,\ T_k^q] = q\,T_k^q \tag{1-17b}$$

relations fondamentales de commutations de ces opérateurs avec les composantes du moment cinétique, qui réciproquement entraînent les relations (1-16).

L'utilisation de ces opérateurs est liée cependant à l'une de leurs propriétés, connue sous le nom de théorème de Wigner-Eckart. Ce théorème établit que les éléments de matrice d'une composante T_k^q d'un opérateur tensoriel irréductible $\vec{T}_k$ entre deux états de deux multiplicités données sont proportionnels à un coefficient de Clebsch-Gordon ; explicitement :

$$<\gamma'J'M'|\,T_k^q\,|\,\gamma JM> = (-)^{J-M}\,\frac{<J'M'J\ -M|kq>}{(2k+1)^{1/2}}\,<\gamma'J'\|\vec{T}_k\|\gamma J> \tag{1-18}$$

Autrement dit, toutes les propriétés "géométriques" de la composante T_k^q sont contenues dans le coefficient de Clesbsh-Gordon $(-)^{J-M}<J'M'J\ -M|kq>$, tandis que les particularités propres au tenseur spécial $\vec{T}_k$ choisi se retrouvent dans l'élément de matrice réduit $<\gamma'J'\|\vec{T}_k\|\gamma J>$ qui est le même pour toutes les composantes de $\vec{T}_k$ et ne dépend que de J et de J' sans faire intervenir M et M'.

La détermination de cet élément de matrice réduit qui est le seul facteur inconnu du second membre de (1-18) pourra donc être effectuée en calculant l'élément de matrice d'une composante T_k^q entre les états propres $|\gamma JM>$ et $|\gamma J'M'>$, composante et états propres choisis spécialement pour simplifier le calcul.

b) Expression de $\vec{P}$ en série d'opérateurs tensoriels irréductibles.

Développons dans l'expression (1-10) de l'opérateur P, $f(\vec{k}.\vec{r}_n)$ et $e^{i\vec{k}.\vec{r}_n}$ en série d'harmoniques sphériques. Il vient :

$$\vec{P} = \sum_n \sum_\nu i^\nu (2\nu+1) \left\{ \frac{1}{2} f_\nu(k\,r_n)\,[\vec{l}_n P_\nu(\cos\vartheta_n) + P_\nu(\cos\vartheta_n)\,\vec{l}_n] + 2\,j_\nu(k\,r\,n)\,P_\nu(\cos\vartheta_n)\,\vec{s}_n \right\} \tag{1-19}$$

Expression où l'on a posé :

$$f_\nu(x) = \frac{2}{x^2}\int_0^x y\,j_\nu(y)\,dy \tag{1-19a}$$

---

(1) Les propriétés des opérateurs tensoriels irréductibles utilisées au cours de cet article sont exposées dans presque tous les livres de mécanique quantique. Nous n'en donnerons pas les démonstrations, nous contentant de renvoyer le lecteur au formulaire très complet et très pratique de A.R. Edmonds [4].

$j_\nu(x)$ est la fonction de Bessel sphérique :

$$j_\nu(x) = \left(\frac{\pi}{2x}\right)^{1/2} J_{\nu+\frac{1}{2}}(x) .$$

Nous obtenons alors :

$$<\gamma J'M' \mid \vec{P} \mid \gamma JM> = \sum_\nu i^\nu (2\nu+1) \left\{ \frac{1}{2} \sum_n <J'M' \mid \vec{l}_n P_\nu(\cos\vartheta_n) + P_\nu(\cos\vartheta_n) \vec{l}_n \mid JM> F_\nu^L(k) + \right.$$

$$\left. + \sum_n <J'M' \mid \vec{s}_n P_\nu(\cos\vartheta_n) + P_\nu(\cos\vartheta_n) \vec{s}_n \mid JM> F_\nu^S(k) \right\} \qquad (1\text{-}20)$$

On a posé :

$$F_\nu^L(k) = \frac{\int f_\nu(kr) \Phi_i^*(r) \Phi_i(r) r^2 dr}{\int \Phi_i^*(r) \Phi_i(r) r^2 dr} \qquad (1\text{-}20a)$$

$$F_\nu^S(k) = \frac{\int j_\nu(kr) \Phi_i^*(r) \Phi_i(r) r^2 dr}{\int \Phi_i^*(r) \Phi_i(r) r^2 dr} \qquad (1\text{-}20b)$$

où $\Phi_i(r)$ est la fonction d'onde radiale à un électron de la couche incomplète i.

Choix des opérateurs tensoriels irréductibles :

On notera dans (1-20) l'analogie formelle entre les deux parties intervenant dans l'élément de matrice : la partie "orbitale" et la partie de spin.

Elles s'écrivent toutes les deux :

$$\vec{j} P_\nu(\cos\vartheta) + P_\nu(\cos\vartheta) \vec{j} \qquad (1\text{-}21)$$

où $\vec{j}$ est un certain moment cinétique.

C'est à cette expression que nous allons tenter de trouver un équivalent en fonction d'opérateurs tensoriels irréductibles. Bien entendu nous pensons tout d'abord à un produit de tels opérateurs. La présence du moment cinétique $\vec{j}$ nous impose pratiquement l'un d'eux, c'est l'opérateur d'ordre 1, $\vec{\mathcal{J}}$ tel que :

$$\mathcal{J}^{\pm 1} = \mp \frac{1}{\sqrt{2}} j^\pm \qquad \mathcal{J}^0 = j_z . \qquad (1\text{-}22)$$

L'autre opérateur devra être recherché parmi les équivalents à $P_\nu(\cos\vartheta)$.

Or :
$$P_\nu(\cos\vartheta_n) = \left(\frac{4\pi}{2\nu+1}\right)^{1/2} Y_\nu^0(\vartheta_n, \varphi_n) .$$

Nous introduirons donc l'opérateur tensoriel irréductible $\vec{Y}_\nu(\vartheta_n, \varphi_n)$ dont les $2\nu+1$ composantes sont les harmoniques $Y_\nu^q(\vartheta_n, \varphi_n)$ et qui est relatif à un seul électron.

Nous pouvons calculer l'élément de matrice réduit de cet opérateur entre les multiplicités J' et J. En effet ; le théorème de Wigner-Eckart nous permet d'écrire :

$$<J'M' \mid Y_\nu^q(\vartheta_n, \varphi_n) \mid JM> = (-)^{J-M} \frac{<J'MJ - M \mid \nu q>}{(2\nu+1)^{1/2}} <J' \parallel \vec{Y}_\nu(\vartheta_n, \varphi_n) \parallel J>$$

Or $Y_\nu^q(\vartheta_n, \varphi_n)$ n'agit en fait que dans la multiplicité 1, relative à la couche incomplète i, c'est-à-dire que $<J \parallel \vec{Y}_\nu(\vartheta_n, \varphi_n) \parallel J>$ est proportionnel à $<1 \parallel \vec{Y}_\nu(\vartheta_n, \varphi_n) \parallel 1>$ et comme :

$$<11 \mid Y_\nu^0(\vartheta_n, \varphi_n) \mid 11> = \frac{<111 - 1 \mid \nu 0>}{(2\nu+1)^{1/2}} <1 \parallel \vec{Y}_\nu(\vartheta_n, \varphi_n) \parallel 1>$$

$$= (2\nu+1)^{1/2} \frac{2l+1}{\sqrt{4\pi}} \begin{pmatrix} l & \nu & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l & \nu & l \\ 1 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

nous obtiendrons aisément l'élément de matrice réduit en exprimant le coefficient de Clebsch-Gordon en fonction du coefficient 3j :

$$< l\,1\,l\,-1\,|\,\nu\,0> = (-)^{l}\,(2\nu+1)^{1/2}\begin{pmatrix} 1 & \nu & 1 \\ 1 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Le résultat est :

$$< l \,\|\, \vec{Y}_\nu\,(\vartheta_n, \varphi_n)\,\|\, l> = (-)^{l}\,\frac{(2l+1)(2\nu+1)^{1/2}}{\sqrt{4\pi}}\begin{pmatrix} 1 & \nu & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \qquad (1\text{-}23)$$

Dans la suite cet élément de matrice réduit apparaîtra en facteur dans toutes les expressions. Il traduit le fait que la couche incomplète i est caractérisée par le nombre quantique l. Pour ne pas avoir à le récrire nous allons définir un nouvel opérateur tensoriel irréductible $\vec{\mathcal{Y}}_\nu(\vartheta, \varphi)$ tel que :

$$< j'm'\,|\,\mathcal{Y}_\nu^q(\vartheta, \varphi)\,|\,j\,m> = (-)^{j-m}< j'm'j - m\,|\,\nu\,q> \qquad (1\text{-}24)$$

autrement dit tel que :

$$< j' \,\|\, \vec{\mathcal{Y}}_\nu \,\|\, j> = (2\nu+1)^{1/2}$$

En particulier on aura :

$$< l l'_z\,|\,\mathcal{Y}_\nu^q(\vartheta_n, \varphi_n)\,|\,l l_z> = (-)^{l-l_z}< l l'_z\;\; l - l_z\;|\;\nu q>$$

On voit que $\vec{\mathcal{Y}}_\nu(\vartheta_n, \varphi_n)$ est proportionnel à $\vec{Y}_\nu(\vartheta_n, \varphi_n)$. Le coefficient de proportionnalité est donné par [1] :

$$\vec{Y}_\nu(\vartheta_n, \varphi_n) = (2l+1)(4\pi)^{-1/2}\,(-)^{l}\begin{pmatrix} 1 & \nu & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}\,\vec{\mathcal{Y}}_\nu(\vartheta_n, \varphi_n)$$

La relation entre les polynômes de Legendre et les harmoniques sphériques nous permet d'écrire :

$$\begin{aligned} < J'M'\,|\,P_\nu\,(\cos\vartheta_n)\,|\,JM> &= \frac{(2l+1)}{(2\nu+1)^{1/2}}\,(-)^{l}\begin{pmatrix} 1 & \nu & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}< J'M'\,|\,\mathcal{Y}_\nu^\circ(\vartheta_n, \varphi_n)\,|\,JM> \\ &= G(1\,|\,P_\nu\,|\,1)< J'M'\,|\,\mathcal{Y}_\nu^\circ(\vartheta_n, \varphi_n)\,|\,JM> \end{aligned}$$

$$G(1\,|\,P_\nu\,|\,1) = (-)^{l}\,\frac{2l+1}{(2\nu+1)^{1/2}}\begin{pmatrix} 1 & \nu & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \qquad (1\text{-}25)$$

On remplacera donc partout $P_\nu(\cos\vartheta)$ par la composante $\mathcal{Y}_\nu^\circ$ qui lui est proportionnelle, le moment cinétique $j^{\pm}$ par la composante $\mathcal{J}^q$ correspondante, et l'élément de matrice (1-20) deviendra :

$$\begin{aligned} < J'M'\,|\,P_\pm\,|JM> = \mp\sqrt{2}\sum_\nu\sum_n G(1\,|\,P_\nu\,|\,1)\;i^\nu\,(2\nu+1)\Big\{ &\frac{F_\nu^l(k)}{2}< J'M'\,|\,\mathcal{E}_n^{\pm1}\,\mathcal{Y}_\nu^\circ(\vartheta_n, \varphi_n) + \\ + \mathcal{Y}_\nu^\circ(\vartheta_n, \varphi_n)\,\mathcal{E}_n^{\pm1}\,|JM> + F_\nu^s(k)< J'M'\,|\,\mathcal{S}_n^{\pm1}\,\mathcal{Y}_\nu^\circ(\vartheta_n, \varphi_n) + \mathcal{Y}_\nu^\circ(\vartheta_n, \varphi_n)\,\mathcal{S}_n^{\pm1}\,|JM>\Big\} \end{aligned} \qquad (1\text{-}26)$$

Le problème se ramène donc au calcul des éléments de matrice d'un produit d'opérateurs tensoriels symétrisé :

$$\mathcal{J}^{\pm1}\,\mathcal{Y}_\nu^\circ + \mathcal{Y}_\nu^\circ\,\mathcal{J}^{\pm1} \qquad (1\text{-}27)$$

Cette somme de produit d'opérateurs pourra être développée en série d'opérateurs tensoriels irréductibles en posant [2] :

$$[\mathcal{J}^{\pm1}\;\mathcal{Y}_\nu^\circ + \mathcal{Y}_\nu^\circ\;\mathcal{J}^{\pm1}] = \sum_{p,q}< 1\;\pm1\;\nu\;0\,|\,pq>\,X_p^q(\mathcal{J}) \qquad (1\text{-}28)$$

$X_p^q(\mathcal{J})$ est la qième composante d'un opérateur tensoriel d'ordre p dont on peut obtenir l'expression par inversion de la formule (1-28). Il vient, compte tenu des propriétés d'orthogonalité des coefficients de Clebsch-Gordon :

$$X_p^q(\mathcal{J}) = \sum_{q_1 q_2}< 1\;\;q_1\;\nu\;\;q_2\,|\,pq>\,(\mathcal{J}^{q_1}\,\mathcal{Y}_\nu^{q_2} + \mathcal{Y}_\nu^{q_2}\,\mathcal{J}^{q_1}) \qquad (1\text{-}29)$$

---

(1) En particulier : $< J' \,\|\, \vec{Y}_\nu(\theta_n, \varphi_n)\,\|\, J> = \frac{(2\nu+1)^{1/2}}{\sqrt{4\pi}}\;G(1\,|\,P_\nu\,|\,1)< J' \,\|\, \vec{\mathcal{Y}}_\nu(\theta_n, \varphi_n)\,\|\, J>$ où $G(1\,|\,P_\nu\,|\,1$ est donné par l'équation (1-25).

(2) Cf. Edmonds, op. cit. Ch. 5 et 7.

L'élément de matrice (1-26) s'écrira donc :

$$< J'M' | P_{\pm} | JM > = \mp\sqrt{2} \sum_{n} \sum_{\nu} G(1 | P_{\nu} | 1)\, i^{\nu} (2\nu + 1)$$

$$\left\{ \frac{F_{\nu}^{L}(k)}{2} \sum_{pq} < 1 \pm 1\ \nu\ 0 | pq >< J' \| \vec{X}_{p}(\mathcal{L}) \| J > (-)^{J-M} \frac{< J'M'J - M | pq >}{(2p+1)^{1/2}} \right.$$

$$\left. + F_{\nu}^{S}(k) \sum_{p'q'} < 1 \pm 1\ \nu\ 0 | p'q' >< J' \| \vec{X}_{p'}(\mathcal{S}) \| J > (-)^{J-M} \frac{< J'M'J - M | p'q' >}{(2p'+1)^{1/2}} \right\} \qquad (1\text{-}30)$$

équation que l'on obtient par application du théorème de Wigner-Eckart. Le calcul des éléments de matrice se réduit donc à la détermination des deux éléments de matrice réduits :

$$< J' \| \vec{X}_{p'}(\mathcal{S}) \| J > \quad \text{et} \quad < J' \| \vec{X}_{p}(\mathcal{L}) \| J >$$

c) Forme générale des éléments de matrice réduits d'un produit d'opérateurs tensoriels irréductibles :

Soit $\vec{X}_k$ un opérateur tensoriel irréductible agissant dans les multiplicités J et J', formé par le produit de deux opérateurs tensoriels irréductibles $\vec{T}_{k_1}$ et $\vec{U}_{k_2}$ agissant respectivement dans les multiplicités j_1, j_1' et j_2, j_2'. On aura :

$$X_k^q = \sum_{q_1, q_2} < k_1 q_1 k_2 q_2 | kq > T_{k_1}^{q_1} U_{k_2}^{q_2} \qquad (1\text{-}31)$$

Dans l'appendice (I) il est démontré que l'élément de matrice réduit de $\vec{X}_k$ s'écrit :

$$< \gamma' j_1' j_2' J' \| \vec{X}_k \| \gamma j_1 j_2 J > = \sum_{\gamma''} < \gamma' j_1' \| \vec{T}_{k_1} \| \gamma'' j_1 >< \gamma'' j_2' \| \vec{U}_{k_2} \| \gamma j_2 >$$

$$[(2J+1)(2J'+1)(2k+1)]^{1/2} \begin{Bmatrix} j_1' & j_1 & k_1 \\ j_2' & j_2 & k_2 \\ J' & J & k \end{Bmatrix} \qquad (1\text{-}32)$$

Expression qui est de la forme attendue puisque le coefficient 9-J exprime le fait que l'on a couplé les états

j_1' et j_2' pour obtenir J'

j_1 et j_2 pour obtenir J

et les opérateurs de degré

k_1 et k_2 pour obtenir k.

Nous pouvons particulariser la formule (1-32) au cas où l'opérateur $\vec{X}_k$ n'agit seulement que dans les multiplicités j_1' et j_1. On posera alors $X_k^q = T_{k_1}^{q_1}$ c'est-à-dire que l'on fera $k_1 = k$, $k_2 = 0$ et $\vec{U}_{k_2} = 1$ dans (1-32). Il vient :

$$< \gamma' j_1' j_2' J' \| \vec{X}_k \| \gamma j_1 j_2 J > = (-)^{j_1' + j_2' + J + k} [(2J+1)(2J'+1)]^{1/2} \begin{Bmatrix} j_1' & J & j_2 \\ J' & j_1 & k \end{Bmatrix} \times < \gamma' j_1' \| \vec{X}_k \| \gamma j_1 > \qquad (1\text{-}33)$$

Les expressions (1-32) et (1-33) nous permettront de calculer les éléments de matrice réduits des opérateurs $\vec{X}_p(\mathcal{L})$ et $\vec{X}_p(\mathcal{S})$.

d) Eléments de matrice réduits de l'opérateur "de spin" $\vec{X}_p(\mathcal{S})$.

$\vec{X}_p(\mathcal{S})$ est le produit d'un opérateur tensoriel agissant dans la multiplicité S et d'un opérateur "orbital" agissant dans la multiplicité L. Nous pourrons appliquer (1-32) et écrire :

$$< J' \| \vec{X}_p(\mathcal{S}) \| J > = 2 \sum_{n} < S \| \vec{\mathcal{S}}_n \| S >< L \| \vec{\mathcal{Y}}_{\nu}(\vartheta_n, \varphi_n) \| L >$$

$$[(2J+1)(2J'+1)(2p+1)]^{1/2} \begin{Bmatrix} L & L & \nu \\ S & S & 1 \\ J' & J & p \end{Bmatrix} \qquad (1\text{-}34)$$

le facteur 2 provenant de ce que l'on a considéré la somme $\mathfrak{S}\mathfrak{Y}_\nu + \mathfrak{Y}_\nu \mathfrak{S}$. Restent à déterminer les deux éléments de matrice réduits :

$$< S \| \vec{\mathfrak{S}}_n \| S > \quad \text{et} \quad < L \| \vec{\mathfrak{Y}}_\nu (\vartheta_n, \varphi_n) \| L >.$$

Nous obtiendrons le premier en calculant l'élément de matrice particulier :

$$< SS | \mathfrak{S}_n^\circ | SS > = < SS | s_z(n) | SS > = < S \| \vec{\mathfrak{S}}_n \| S > \frac{< SSS - S | 10 >}{\sqrt{3}} \tag{1-35}$$

Le membre de gauche est l'élément de matrice d'un opérateur à un électron pris dans un ensemble de spins électroniques que nous avons supposés obéir à la règle de Hund ; il s'ensuit bien évidemment que :

$$< SS | \mathfrak{S}_n^\circ | SS > = \frac{S}{n} \tag{1-36}$$

où n est le nombre d'électrons. Et par conséquent, en explicitant le coefficient de Clebsch-Gordon de (1-34) :

$$< S \| \vec{\mathfrak{S}}_n \| S > = \frac{1}{n} [S(S+1)(2S+1)]^{1/2} \tag{1-37}$$

Le calcul du deuxième élément de matrice réduit est tout à fait analogue :

$$< LL | \mathfrak{Y}_\nu^\circ (\vartheta_n, \varphi_n) | LL > = < L \| \vec{\mathfrak{Y}}_\nu (\vartheta_n, \varphi_n) \| L > \frac{< LLL - L | \nu\ 0 >}{(2\nu+1)^{1/2}} \tag{1-38}$$

Le membre de gauche correspond à l'élément de matrice d'un opérateur à un électron pris entre des déterminants de Slater orbitaux. Dans le cas de la règle de Hund on aura :

$$\begin{aligned} < LL | \mathfrak{Y}_\nu^\circ (\vartheta_n, \varphi_n) | LL > &= \frac{1}{n} \Big\{ < 11 | \mathfrak{Y}_\nu^\circ | 11 > + < 11 - 1 | \mathfrak{Y}_\nu^\circ | 11 - 1 > + \dots \\ &\qquad + < 1\ 1 - n + 1 | \mathfrak{Y}_\nu^\circ | 1\ 1 - n\ 1\ 1 > \Big\} \\ &= \frac{1}{n} \sum_{r=1}^{n} \mathfrak{R}_\nu^l (1 - r + 1) \end{aligned} \tag{1-39}$$

on a posé :

$$\mathfrak{R}_\nu^j (\alpha) = (-)^{j-\alpha} < j\ \alpha\ j - \alpha | \nu\ 0 > = < j\ \alpha | \mathfrak{Y}_\nu^\circ | j\ \alpha > \tag{1-40}$$

(Remarque : L'expression (1-39) n'est correcte que si le nombre d'électrons n est inférieur ou égal à la moitié du nombre possible d'électrons de la couche i, N/2. Au-dessus de ce nombre la sommation doit porter sur les "trous" (1)).

Il s'en suit que :

$$\begin{aligned} < L \| \vec{\mathfrak{Y}}_\nu (\vartheta_n, \varphi_n) \| L > &= \frac{1}{n} (2\nu+1)^{1/2} \frac{\sum_{r=1}^{n} \mathfrak{R}_\nu^l (1 - r + 1)}{\mathfrak{R}_\nu^l (L)} \\ &= (2\nu+1)^{1/2}\ G(l_1 \dots l_n | \vec{\mathfrak{Y}}_\nu | l_1 \dots l_n) \end{aligned} \tag{1-41}$$

et que :

---

(1) On peut également considérer que les fonctions $\mathfrak{R}_\nu^l(\alpha)$ qui sont des polynômes en α de degré ν sont définies même pour $\alpha > 1$ ou $\alpha < -1$ (Polynômes de Jordan). Dans ce cas l'expression (1-39) peut être sommée sur tous les électrons même si ceux-ci sont plus nombreux que N/2. On retrouve le même résultat que si l'on considère les trous.

$$< J' \| \vec{X}_p(\mathfrak{S}) \| J > = 2\,[S(S+1)(2S+1)]^{1/2}\,(2\nu+1)^{1/2}\,G(l_1 \ldots l_n, \vec{\mathcal{Y}}_\nu, l_1 \ldots l_n)$$

$$\times\,[(2J+1)(2J'+1)(2p+1)]^{1/2} \begin{Bmatrix} L & L & \nu \\ S & S & 1 \\ J' & J & p \end{Bmatrix} \qquad (1\text{-}42)$$

e) Eléments de matrice réduits de l'opérateur "orbital" $\vec{X}_p(\mathcal{L})$.

L'opérateur $\vec{X}_p(\mathcal{L})$ n'agit en fait que sur la partie "orbitale" des multiplicités J' et J. Posons :

$$\vec{X}_p(\mathcal{L}) = \sum_n \vec{X}_p(n) \qquad (1\text{-}43)$$

L'application de la formule (1-33) conduit à :

$$< J' \| \vec{X}_p(n) \| J > = < L \| \vec{X}_p(n) \| L > (-)^{L+S+J+p}\,[(2J'+1)(2J+1)]^{1/2} \begin{Bmatrix} L & J' & S \\ J & L & p \end{Bmatrix} \qquad (1\text{-}44)$$

Il nous reste à calculer l'élément de matrice réduit dans la multiplicité L. Utilisant toujours la même technique on écrira :

$$< LL \,|\, X^\circ_p(n) \,|\, LL > = < L \| \vec{X}_p(n) \| L > \frac{< LL\ L - L \,|\, p\ 0 >}{(2p+1)^{1/2}} \qquad (1\text{-}45)$$

Le membre de gauche est l'élément de matrice d'un opérateur à un électron pris entre des déterminants de Slater orbitaux. Dans le cas de la règle de Hund ceci vaut :

$$< LL \,|\, X^\circ_p(n) \,|\, LL > = \sum_{r=1}^{n} < l\ l-r+1 \,|\, X^\circ_p(n) \,|\, l\ l-r+1 >$$

$$= \frac{1}{n}\,\frac{< l \| \vec{X}_p(n) \| l >}{(2p+1)^{1/2}} \sum_{r=1}^{n} < l\ l-r+1\ \ l-1+r-1 \,|\, \nu\ 0 > \qquad (1\text{-}46)$$

Nous sommes de nouveau ramenés à la détermination d'un élément de matrice réduit dans la multiplicité 1 ; il vient :

$$< ll \,|\, X^\circ_p(n) \,|\, ll > = \frac{< l \| \vec{X}_p(n) \| l >}{(2p+1)^{1/2}} < l\,l\ \ l-1 \,|\, p\ 0 > . \qquad (1\text{-}47)$$

Pour calculer l'élément de matrice de gauche, il nous faut expliciter $X^\circ_p(n)$. D'après les définitions (1-28) et (1-31) :

$$X^\circ_p(n) = < l\ \ l\ \ \nu-1 \,|\, p\ 0 > (\mathcal{L}^{+1}\,\mathcal{Y}^{-1}_\nu + \mathcal{Y}^{-1}_\nu\,\mathcal{L}^{+1})$$

$$+ < l\ \ 0\ \ \nu\ \ 0 \,|\, p\ 0 > (\mathcal{L}^{0}\,\mathcal{Y}^{0}_\nu + \mathcal{Y}^{0}_\nu\,\mathcal{L}^{0})$$

$$+ < l\ -1\ \ \nu\ \ 1 \,|\, p\ 0 > (\mathcal{L}^{-1}\,\mathcal{Y}^{1}_\nu + \mathcal{Y}^{1}_\nu\,\mathcal{L}^{-1})$$

ou bien :

$$X^\circ_p(n) = -\frac{1}{\sqrt{2}} < l\ \ l\ \ \nu-1 \,|\, p\ 0 > (l^+\,\mathcal{Y}^{-1}_\nu + \mathcal{Y}^{-1}_\nu\,l^+)$$

$$+ < l\ \ 0\ \ \nu\ 0 \,|\, p\ 0 > (l_z\,\mathcal{Y}^{0}_\nu + \mathcal{Y}^{0}_\nu\,l_z) \qquad (1\text{-}48)$$

$$+ \frac{1}{\sqrt{2}} < l\ -1\ \ \nu\ \ 1 \,|\, p\ 0 > (l^-\,\mathcal{Y}^{1}_\nu + \mathcal{Y}^{1}_\nu\,l^-)$$

Ce qui conduit à :

$$< 11 | X^{\circ}_{p}(n) | 11 >= -\frac{1}{\sqrt{2}} < 11 | 1^{+} \mathcal{Y}^{-1}_{\nu} + \mathcal{Y}^{-1}_{\nu} 1^{+} | 11 >< 1 \; 1 \; \nu - 1 | p \; 0 >$$

$$+ < 11 | 1_z \mathcal{Y}^{\circ}_{\nu} + \mathcal{Y}^{\circ}_{\nu} 1_z | 11 >< 1 \; 0 \; \nu \; 0 | p \; 0 > \qquad (1\text{-}49)$$

$$+ \frac{1}{\sqrt{2}} < 11 | 1^{-} \mathcal{Y}^{1}_{\nu} + \mathcal{Y}^{1}_{\nu} 1^{-} | 11 >< 1 - 1 \; \nu \; 1 | p \; 0 >$$

C'est-à-dire à :

$$\begin{aligned} < 11 | X^{\circ}_{p}(n) | 11 >= & - \sqrt{1} < 1 \; 1 - 1 | \mathcal{Y}^{-1}_{\nu} \; 11 >< 1 \; 1 \; \nu - 1 | p \; 0 > \\ & + 2 1 < 1 \; 1 | \mathcal{Y}^{\circ}_{\nu} | 11 >< 1 \; 0 \; \nu \; 0 | \; p \; 0 > \\ & + \sqrt{1} < 11 | \mathcal{Y}^{1}_{\nu} | \; 1 \; 1 - 1 >< 1 - 1 \; \nu \; 1 | p \; 0 > \\ = & \sqrt{1} \left\{ < 1 \; 1 \; \nu - 1 | p \; 0 >< 1 \; 1 - 1 \; 1 - 1 | \nu - 1 > (1 + (-)^{p-\nu+1}) \right. \\ & \left. - 2 \sqrt{1} < 1 \; 0 \; \nu \; 0 | p \; 0 >< 11 \; 1 - 1 | \nu \; 0 > \right\} \end{aligned} \qquad (1\text{-}50)$$

Expression où l'on a tenu compte de la valeur des éléments de matrice de $\mathcal{Y}^{q}_{\nu}$ et des propriétés de symétrie des coefficients de Clebsch-Gordon.

L'élément de matrice réduit dans la multiplicité 1 vaut donc :

$$< 1 \| \vec{X}_{p}(n) \| 1 > = -\frac{(2p+1)^{1/2}}{< 11 \; 1 - 1 | p \; 0 >} \sqrt{1} \left[(1 + (-)^{p-\nu+1}) < 1 \; 1 \; \nu - 1 | p \; 0 >< 1 \; 1 - 1 \; 1 - 1 | \; \nu - 1 > \right.$$

$$\left. - 2 \sqrt{1} < 1 \; 0 \; \nu \; 0 | p \; 0 > < 11 \; 1 - 1 | \; \nu \; 0 > \right] \qquad (1\text{-}51)$$

Celui de la multiplicité L sera :

$$< L \| \vec{X}_{p}(n) \| L > = \frac{- \sqrt{1} (2p+1)^{1/2}}{< 11 \; 1 - 1 | p \; 0 >} \left[(1 + (-)^{p-\nu+1}) < 1 \; 1 \; \nu - 1 | p \; 0 >< 1 \; 1 - 1 \; 1 - 1 | \nu - 1 > \right.$$

$$\left. - 2 \sqrt{1} < 1 \; 0 \; \nu \; 0 | p \; 0 >< 11 \; 1 - 1 | \nu \; 0 > \right] \frac{\sum_{r=1}^{n} < 11 - r + 1 \; 1 - 1 + r - 1 | p \; 0 >}{n < L \; L \; L - L | p \; 0 >} \qquad (1\text{-}52)$$

Et l'élément de matrice réduit cherché a pour expression :

$$\begin{aligned} & < J' \| \vec{X}_{p}(\mathcal{L}) \| J > = \sum_{n} < J' \| \vec{X}_{p}(n) \| J > \\ & = -\frac{\sqrt{1} (2p+1)^{1/2}}{< 11 \; 1 - 1 | p \; 0 >} \left[(1 + (-)^{p-\nu+1}) < 1 \; 1 \; \nu - 1 | p \; 0 >< 1 \; 1 - 1 \; 1 - 1 | \nu - 1 > \right. \\ & \left. - 2 \sqrt{1} < 1 \; 0 \; \nu \; 0 | p \; 0 >< 11 \; 1 - 1 | \nu \; 0 > \right] \frac{\sum_{r=1}^{n} \mathcal{R}^{l}_{p}(1 - r + 1)}{\mathcal{R}^{L}_{p}(L)} \times \\ & \times (-)^{L+S+J+p} \begin{Bmatrix} L & J' & S \\ J & L & p \end{Bmatrix} (2J' + 1)^{1/2} \; (2J + 1)^{1/2} \end{aligned} \qquad (1\text{-}53)$$

f) Valeur des éléments de matrice de l'opérateur $\vec{P}$.

Nous allons regrouper les résultats précédents pour obtenir l'expression finale des éléments de matrice de $\vec{P}$.

L'équation de définition (1-28) nous montre que pour les opérateurs $\vec{X}_{p}(\mathcal{S})$ et $\vec{X}_{p}(\mathcal{L})$ nous n'avons en fait à considérer que les valeurs $p = \nu$ et $p = \nu \pm 1$, et pour ces valeurs de p que les composantes $q = \pm 1$. De plus nous constatons également qu'il est inutile de conserver l'opérateur $\vec{X}_{\nu}(\mathcal{L})$ qui a un élément de matrice réduit nul d'après (1-53) puisque :

$$< 1\ 0\ \nu\ 0 \mid \nu\ 0 > = 0$$

car ν est entier (1).

On écrira donc (2) :

$$\sum_n i^\nu (2\nu+1) < J'M' \mid s_n^\pm P_\nu(\cos\vartheta_n) + P_\nu(\cos\vartheta_n)\, s_n^\pm \mid JM > F_\nu^S(k)$$
$$= + i^\nu F_\nu^S(k) \left[< J' \| \mathcal{G}^S_{\nu,\nu-1} \| J > < J'M' \mid \mathcal{Y}^{\pm 1}_{\nu-1} \mid JM > \right.$$

$$\pm < J' \| \mathcal{G}^S_{\nu\nu} \| J > < J'M' \mid \mathcal{Y}^{\pm 1}_{\nu} \mid JM >$$

$$\left. + < J' \| \mathcal{G}^S_{\nu,\nu+1} \| J > < J'M' \mid \mathcal{Y}^{\pm 1}_{\nu+1} \mid JM > \right] . \qquad (1\text{-}54)$$

Expression que l'on déduit immédiatement de (1-42) et de (1-30) en tenant compte de la relation de définition (1-28). On a posé :

$$< J' \| \mathcal{G}^S_{\nu,\nu+p} \| J > = 2\sqrt{2}\, G(1 \mid P\nu \mid 1)(2\nu+1)^{3/2} \left[S(S+1)(2S+1) \right]^{1/2}$$

$$G(l_1 \ldots l_n \mid \mathcal{Y}_\nu \mid l_1 \ldots l_n) \left[(2J'+1)(2J+1) \right]^{1/2} < 1\ 1\ \nu\ 0 \mid \nu + p\ 1 > \begin{Bmatrix} L & L & \nu \\ S & S & 1 \\ J' & J & \nu+p \end{Bmatrix} \qquad (1\text{-}55)$$

L'élément de matrice orbital devient (3) :

$$\frac{i^\nu}{2} (2\nu+1) < J'M' \mid \sum_n (l_n^\pm P_\nu(\cos\vartheta_n) + P_\nu(\cos\vartheta_n)\, l_n^\pm) \mid JM > F_\nu^L(k)$$

$$= \mp\ i^\nu < J' \| \mathcal{G}^L_{\nu,\nu-1} \| J > < J'M' \mid \mathcal{Y}^{\pm 1}_{\nu-1} \mid JM > F_\nu^L(k)$$

$$\mp\ i^\nu < J' \| \mathcal{G}^L_{\nu,\nu+1} \| J > < J'M' \mid \mathcal{Y}^{\pm 1}_{\nu+1} \mid JM > F_\nu^L(k) \qquad (1\text{-}56)$$

Expression obtenue par la combinaison des équations (1-53), (1-30) et (1-28) :

On a posé :

---

(1) On retrouve ici une propriété utilisée par Trammel [2] et Odiot et Saint-James [3] pour donner un équivalent opératoriel à une somme de la forme $j^\pm \mathcal{Y}^\circ_\nu + \mathcal{Y}^\circ_\nu j^\pm$ agissant dans une même multiplicité J. Il est montré dans ces deux articles que l'on peut écrire :

$$j^\pm \mathcal{Y}^\circ_\nu + \mathcal{Y}^\circ_\nu j^\pm \simeq \alpha^{(j)}_{\nu,\nu-1}\, \mathcal{Y}^{\pm 1}_{\nu-1} + \alpha^{(j)}_{\nu,\nu+1}\, \mathcal{Y}^{\pm 1}_{\nu+1} \qquad (1)$$

où les $\alpha^{(j)}_{\nu,\nu+p}$ sont des constantes analogues à celles définies par (1-59) mais que l'on obtient sous une forme et par un raisonnement différents et plus laborieux.

La propriété annoncée généralise le développement (1) au cas où les opérateurs agissent entre deux multiplicités J et J' différentes. Le terme en $\alpha^{(j)}_{\nu,\nu}\, \mathcal{Y}^{\pm 1}_\nu$ n'intervient pas à la condition que $\vec{j}$ et $\mathcal{Y}^\circ_\nu$ soient tous les deux des opérateurs orbitaux.

Si $\vec{j}$ est un opérateur de spin on obtient l'équation (1-42) ou (1-54) qui prouve que le développement (1) n'est plus valable si $J' \neq J$.

Montrons pour terminer que si $J' = J$ l'opérateur $\vec{X}_\nu(\mathcal{S})$ n'intervient pas. L'élément de matrice est, d'après (1-42), proportionnel à :

$$G = \begin{Bmatrix} L & L & \nu \\ S & S & 1 \\ J & J & \nu \end{Bmatrix}$$

Ce coefficient est nul puisque par échange des deux premières colonnes il se tranforme en :

$$(-)^{2J+2S+2\nu+1}\ G = -G$$

car 2J et 2S ont même parité. Il s'ensuit que $\vec{X}_\nu(\mathcal{S})$ n'intervient pas.

(2) On a tenu également compte de la relation de symétrie.

$$< 1\ 1\ \nu\ 0 \mid \nu + p\ 1 > = (-)^{1-p} < 1\ -1\ \nu\ 0 \mid \nu + p\ -1 >$$

(3) Voir note ci-dessus

$$< J' \| \mathcal{G}^{L}_{\nu,\nu\pm1} \| J > = -\frac{(2\nu+1)n}{2}\, G(1\,|P_\nu|\,1)\, G(L\ S\ J'|\vec{\mathcal{Y}}^{(L)}_{\nu\pm1}|\,L\ S\ J >$$

$$\times\ G(l_1 \ldots l_n|\vec{\mathcal{Y}}_{\nu\pm1}|\,l_1 \ldots l_n)\,\alpha^{L}_{\nu,\nu\pm1} \qquad (1\text{-}57)$$

Avec :

$$G(L\ S\ J'|\vec{\mathcal{Y}}^{(L)}_{\nu\pm1}|\,L\ S\ J > = (-)^{L+S+J+\nu\pm1}\,[(2J+1)(2J'+1)]^{1/2} \begin{Bmatrix} L & J' & S \\ J & L & \nu \pm 1 \end{Bmatrix} \qquad (1\text{-}58)$$

$$\alpha_{\nu,\nu\pm1} = \frac{2\sqrt{2}\,\sqrt{1}<1\ 1\ \nu\ 0\ |\ \nu\pm1\ 1>}{<11\ 1\ -1|\,\nu\pm1\ 0>}\Big\{<1\ 1\ \nu-1\,|\,\nu\pm1\ 0><1\ 1-1\ 11|\,\nu-1> - \sqrt{1}<1\ 0\ \nu\ 0\,|\,\nu\pm1\ 0><11\ 1-1|\,\nu\ 0>\Big\} \qquad (1\text{-}59)$$

Remarque : L'expression (1-59) n'est plus valable lorsque $<1\,1\,1\,-1\,|\,\nu\pm1\ 0>$ est nul. Un retour à l'équation (1-45) et à l'équation (1-46) nous montre que $\alpha^{L}_{\nu,\nu\pm1}$ doit dans ce cas être pris égal à zéro. Dans le tableau I nous avons reporté les équations de définition des diverses constantes qui apparaissent dans (1-54) et (1-57), avec référence aux formules et paragraphes du texte où elles ont été définies.

TABLEAU I

Symbole	Définition	Référence
$G(1\,\|P_\nu\|\,1)$	$(-)^{l}\,\frac{2l+1}{(2\ \ +1)}^{1/2}\begin{pmatrix} l & \nu & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	Eq (1-25)
$\mathcal{R}^{j}_{\nu}(\alpha)$	$(-)^{j-\alpha} <j\alpha\ \ j-\alpha\,|\,\nu\ \ 0>$	Eq (1-40)
$G(l_1 \ldots l_n\,\|\vec{\mathcal{Y}}_\nu\|\,l_1 \ldots l_n)$	$\sum_{r=1}^{n} \frac{\mathcal{R}^{l}_{\nu}(1-r+1)}{\mathcal{R}^{L}_{\nu}(L)}$	Eq (1-41)
$G(L\ S\ J'\,\|\,\vec{\mathcal{Y}}_{\nu\pm1}\|L\ S\ J)$	$(-)^{L+S+J+\nu\pm1}\,(2J+1)^{1/2}\,(2J'+1)^{1/2}\begin{Bmatrix} L & J' & S \\ J & L & \nu\pm1 \end{Bmatrix}$	Eq (1-58)
$\alpha^{l}_{\nu,\nu\pm1}$	$\frac{2\sqrt{2}\,\sqrt{1}<1\ 1\ \nu\ 0\,|\,\nu\ \pm\ 1\ 1>}{<11\ 1\ -1|\,\nu\pm1\ 0>}\Big\{<1\ 1\ \nu\ -1\,|\,\nu\pm1\ 0><1\ 1-1\ 1-1\,|\,\nu-1> - \sqrt{1}<1\ 0\ \nu\ 0\,|\,\nu\pm1\ 0><11\ 1-1|\,\nu\ 0>\Big\}$	Eq (1-59)
$< J' \| \mathcal{G}^{S}_{\nu,\nu+p} \| J >$	$2\sqrt{2}\ G(1\,|P_\nu|\,1)(2\nu+1)^{3/2}\,[S(S+1)(2S+1)]^{1/2} G(l_1 \ldots l_n|\vec{\mathcal{Y}}_\nu|\,l_1 \ldots l_n)$ $\times\ (2J'+1)^{1/2}\,(2J+1)^{1/2}\begin{Bmatrix} L & L & \nu \\ S & S & 1 \\ J' & J & \nu+p \end{Bmatrix}$	Eq (1-55)
$< J' \| \mathcal{G}^{L}_{\nu,\nu\pm1} \| J >$	$-\frac{(2\nu+1)}{2}\ n\ G(1\,|P_\nu|\,1)\,G(L\ S\ J'|\,\vec{\mathcal{Y}}_{\nu\pm1}|\,L\ S\ J)$ $\times\ G(l_1 \ldots l_n|\,\vec{\mathcal{Y}}_\nu|\,l_1 \ldots l_n)\,\alpha^{l}_{\nu,\nu\pm1}$	Eq (1-57)

IV - EXPRESSION GENERALE DE LA SECTION EFFICACE PARAMAGNETIQUE -

En regroupant les formules obtenues précédemment, la section efficace pour un ion magnétique isolé sera :

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{M_N e g_N}{2mc}\right)^2 \sum_{o,f} \frac{e^{-E_o/k_BT}}{\sum_j e^{-E_j/k_BT}} \frac{p_f}{2p_o}$$

$$\left\{ \left| \sum_{J'M'} \sum_{JM} \sum_{\nu=o}^{L} (-)^{\nu} A^{f*}_{M'J'} A^{o}_{MJ} \left[\left(<J' \| \mathcal{G}^{L}_{2\nu,2\nu-1} \| J> F^{L}_{2\nu}(k) + <J' \| \mathcal{G}^{S}_{2\nu,2\nu-1} \| J> F^{S}_{2\nu}(k) \right)_1 <J'M' | \mathcal{Y}^{1}_{2\nu-1} | JM>_1 \right.\right.\right.$$

$$+ \left(<J' \| \mathcal{G}^{S}_{2\nu,2\nu} \| J> F^{S}_{2\nu}(k) \right)_1 <J'M' | \mathcal{Y}^{1}_{2\nu} | JM>_1 + \left(<J' \| \mathcal{G}^{L}_{2\nu,2\nu+1} \| J> F^{L}_{2\nu}(k) + <J' \| \mathcal{G}^{S}_{2\nu,2\nu+1} \| J> F^{S}_{2\nu}(k) \right)$$

$$\times_1 <J'M' | \mathcal{Y}^{1}_{2\nu+1} | JM>_1 \left.\right] \Big|^2 + \Big| \sum_{J'M'} \sum_{JM} \sum_{\nu=o}^{L} (-)^{\nu} A^{f*}_{M'J'} A^{o}_{MJ} \Big[\Big(\left(<J' \| \mathcal{G}^{L}_{2\nu,2\nu-1} \| J> F^{L}_{2\nu}(k) \right.$$

$$+ <J' \| \mathcal{G}^{S}_{2\nu,2\nu-1} \| J> F^{S}_{2\nu}(k) \Big)_1 <J'M' | \mathcal{Y}^{-1}_{2\nu-1} | JM>_1 - \left(<J' \| \mathcal{G}^{S}_{2\nu,2\nu} \| J> F^{S}_{2\nu}(k) \right)_1 <J'M' | \mathcal{Y}^{-1}_{2\nu} | JM>_1$$

$$\left. + \left(<J' \| \mathcal{G}^{L}_{2\nu,2\nu+1} \| J> F^{L}_{2\nu}(k) + <J' \| \mathcal{G}^{S}_{2\nu,2\nu+1} \| J> F^{S}_{2\nu}(k) \right)_1 <J'M' | \mathcal{Y}^{-1}_{2\nu} | JM>_1 \Big] \Big|^2 \right\} \qquad (1\text{-}60)$$

Pour obtenir cette expression on a remarqué que $G(1 | P_\nu | 1)$ est nul pour ν impair et pour $\nu > 21$ par suite des propriétés du coefficient 3J : $\begin{pmatrix} 1 & \nu & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$.

En regroupant les termes on aura :

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{M_N e g_N}{2mc}\right)^2 \sum_{o,f} \frac{e^{-E_o/k_BT}}{\sum_j e^{-E_j/k_BT}} \frac{p_f}{2p_o}$$

$$\left\{ \left| \sum_{J'M'} \sum_{JM} A^{f*}_{M'J'} A^{o}_{MJ} \sum_{\nu=o}^{L} (-)^{\nu} \left[\left(\alpha_\nu(J', J) - \mathcal{B}_{\nu+1}(J', J) \right)_1 <J'M' | \mathcal{Y}^{1}_{2\nu+1} | JM>_1 \right.\right.\right.$$

$$\left. + \mathcal{E}_\nu(J', J)_1 <J'M' | \mathcal{Y}^{1}_{2\nu} | JM>_1 \right] \Big|^2$$

$$+ \Big| \sum_{J'M'} \sum_{JM} A^{f*}_{M'J'} A^{o}_{MJ} \sum_{\nu=1}^{L} (-)^{\nu} \Big[\left(\alpha_\nu(J', J) - \mathcal{B}_{\nu+1}(J', J) \right)_1 <J'M' | \mathcal{Y}^{-1}_{2\nu+1} | JM>_1$$

$$\left. - \mathcal{E}_\nu(J', J)_1 <J'M' | \mathcal{Y}^{-1}_{2\nu} | JM>_1 \Big] \Big|^2 \right\} \qquad (1\text{-}61)$$

Dans cette équation on a posé :

$$\alpha_\nu(J', J) = <J' \| \mathcal{G}^{L}_{2\nu,2\nu+1} \| J> F^{L}_{2\nu}(k) + <J' \| \mathcal{G}^{S}_{2\nu,2\nu+1} \| J> F^{S}_{2\nu}(k) \qquad (1\text{-}62)$$

$$\mathcal{B}_\nu(J', J) = <J' \| \mathcal{G}^{L}_{2\nu,2\nu-1} \| J> F^{L}_{2\nu}(k) + <J' \| \mathcal{G}^{S}_{2\nu,2\nu-1} \| J> F^{S}_{2\nu}(k) \qquad (1\text{-}63)$$

$$\mathcal{E}_\nu(J', J) = <J' \| \mathcal{G}^{S}_{2\nu,2\nu} \| J> F^{S}_{2\nu}(k) \qquad (1\text{-}64)$$

avec la convention $\mathcal{B}_\nu = 0$ pour $\nu > 1$ et $\nu = 0$.

Remarques générales sur l'équation (1-61).

α) Cas des monocristaux :

Nous avons donné ci-dessus l'expression de la section efficace en gardant distincts les référentiels de définition des opérateurs et des états propres. Pour pouvoir utiliser l'équation (1-24) qui donne les éléments de matrice de $\mathcal{Y}^q_\nu$ il nous faut ramener toutes les quantités dans le même référentiel.

Soit $(\alpha\beta\gamma) = (\omega)$ les angles d'Euler amenant les axes du référentiel 1 sur le référentiel de $\vec{k}$. En utilisant les propriétés de transformations (1-16) des opérateurs tensoriels irréductibles, la section efficace devient :

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{M_N e\, g_N}{2mc}\right)^2 \sum_{o,f} \frac{e^{-E_o/k_BT}}{\sum_j e^{-E_j/k_BT}} \frac{p_f}{p_o}$$

$$\left\{ \left| \sum_{J'M'} \sum_{JM} A^{f*}_{M'J'} A^{o}_{MJ} \sum_{\nu=o}^{l} (-)^{\nu} \left[\left(\alpha_\nu(J'J) - \beta_{\nu+1}(J'J) \right) \sum_q \omega^{2\nu+1}_{1,q}(\omega) \langle J'M' | \mathcal{Y}^q_{2\nu+1} | JM \rangle \right. \right. \right.$$

$$\left. \left. \left. + \delta_\nu(J'J) \sum_q \omega^{2\nu}_{1q}(\omega) \langle J'M' | \mathcal{Y}^q_{2\nu} | JM \rangle \right] \right|^2 \right\}$$

+ quantité correspondante avec les matrices $\omega^{2\nu+1}_{-1,q}$ et $\omega^{2\nu}_{-1,q}$. (1-65)

Expression, qui, malgré sa complexité, doit être utilisée pour l'étude des monocristaux, ou celui des atomes qui sont dans un même état $J_z = J$ par exemple (Cf. Ch. II).

β) Cas d'une poudre cristalline.

Il nous faut faire ici une moyenne sur toutes les directions des axes de quantification liés aux cristallites, c'est-à-dire moyenne sur tous les angles d'Euler $(\alpha\beta\gamma) = (\omega)$.

Les matrices de rotation obéissent à la relation :

$$\frac{\int \omega^{j*}_{m_1 m_2}(\omega)\, \omega^{j'}_{m'_1 m'_2}(\omega)\, d\omega}{\int d\omega} = \frac{\delta_{jj'}\, \delta_{m_1 m'_1}\, \delta_{m_2 m'_2}}{(2j+1)} \qquad (1\text{-}66)$$

On aura donc :

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} \simeq \int \left\{ \left| \sum_{J'M'} \sum_{JM} A^{f*}_{M'J'} A^{o}_{MJ} \sum_{\nu=o}^{l} (-)^{\nu} \left[\left(\alpha_\nu(J'J) - \beta_{\nu+1}(J'J) \right) \sum_q \omega^{2\nu+1}_{1,q} \langle J'M' | \mathcal{Y}^q_{2\nu+1} | JM \rangle \right. \right. \right.$$

$$\left. \left. \left. + \delta_\nu(J'J) \sum_q \omega^{2\nu}_{1,q}(\omega) \langle J'M' | \mathcal{Y}^q_{2\nu} | JM \rangle \right] \right|^2 + \text{quantité}$$

correspondante avec $\omega^{2\nu+1}_{-1,q}$ et $\omega^{2\nu}_{-1,q} \Big\} d\omega \Big/ \int d\omega$ (1-67)

Expression qui, après développement et intégration, devient :

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{M_N e\, g_N}{2mc}\right)^{1/2} \sum_{o,f} \frac{p_f}{p_o} \frac{e^{-E_o/k_BT}}{\sum e^{-E_j/k_BT}}$$

$$\times \left\{ \sum_{\nu=o}^{l} \sum_{q=-2\nu-1}^{2\nu+1} \left| \sum_{J'M'} \sum_{JM} A^{f*}_{M'J'} A^{o}_{MJ} \left(\alpha_\nu(J'J) - \beta_{\nu+1}(J'J) \right) \frac{\langle J'M' | \mathcal{Y}^q_{2\nu+1} | JM \rangle}{\sqrt{4\nu+3}} \right|^2 \right.$$

$$\left. + \sum_{\nu=o}^{l} \sum_{q=-2\nu}^{2\nu} \left| \sum_{J'M'} \sum_{JM} A^{f*}_{M'J'} A^{o}_{MJ}\, \delta_\nu(J'J) \frac{\langle J'M' | \mathcal{Y}^q_{2\nu} | JM \rangle}{\sqrt{4\nu+1}} \right|^2 \right\} \qquad (1\text{-}68)$$

Remarque : L'équation obtenue est formellement simple. Elle ne contient que des sommes de carrés pour une valeur de ν donnée. Bien entendu le calcul de chaque terme n'est pas très aisé, mais est cependant tout à fait possible en utilisant un calculateur électronique.

Le fait remarquable est que son obtention, à partir de la formule de départ (1-12), découle de l'application constante du même principe logique : partant des multiplicités J' et J aboutir enfin aux électrons individuels, c'est-à-dire à la multiplicité l via les multiplicités L et S. Dans l'article de Trammel et dans celui d'Odiot et Saint-James, la logique de cette dérivation est beaucoup moins apparente.

On pourrait penser à éviter le stade de calcul dans la multiplicité J' et J c'est-à-dire de partir directement de la forme (1-1a) pour les fonctions d'onde. Le calcul se mène alors d'une façon identique, mais, lors de l'opération de moyenne sur les directions des cristallites, n'apparaissent pas les groupements en somme de carrés, et la formule de section efficace est proprement inextricable, même à l'aide d'un calculateur électronique. Outre que la formule (1-1b) est la forme logique à utiliser dans le cas des terres rares, il est nécessaire de s'en servir pour obtenir la valeur correcte du facteur de forme.

V - FORMES SIMPLIFIEES DE LA SECTION EFFICACE -

Cependant, dans le cas où l'on peut négliger les termes $F^{L}_{2\nu}$ et $F^{S}_{2\nu}$ pour $\nu > 0$, il pourra être avantageux d'utiliser la formule (1-1a) pour obtenir une forme simplifiée de la section efficace (1). C'est ce que nous faisons ci-dessous.

Nous allons partir de la forme (1-1a) des fonctions d'onde. Le calcul se ramène à la détermination d'éléments de matrice de la forme :

$$< SS_z | < LL_z | P_t | LL'_z > | SS'_z >$$

Une partie des calculs faits précédemment se transcrivent ici et nous écrivons directement que :

$$< SS_z | < LL_z | \vec{P} | LL'_z > | SS'_z > = \sum_{\nu} \sum_{n} G(1 | P_\nu | 1)\, i\, (2\nu + 1)$$

$$\Big\{ \frac{F^{L}_{\nu}(k)}{2} < SS_z | < LL_z | \vec{l}_n \mathcal{Y}^{\circ}_{\nu}(\vartheta_n, \varphi_n) + \mathcal{Y}^{\circ}_{\nu}(\vartheta_n, \varphi_n) \vec{l}_n | LL'_z > | SS'_z$$

$$+ F^{S}_{\nu}(k) < SS_z | < LL_z | \vec{s}_n \mathcal{Y}^{\circ}_{\nu}(\vartheta_n, \varphi_n) + \mathcal{Y}^{\circ}_{\nu}(\vartheta_n, \varphi_n) \vec{\varepsilon}_n | LL'_z > | SS'_z \Big\} \qquad (1\text{-}69)$$

et une fois encore nous considérerons un élément de matrice de spin et un élément orbital.

a) Eléments de matrice de spin.

Introduisons de nouveau les opérateurs tensoriels irréductibles d'ordre 1, $\vec{\mathcal{J}}$ et écrivons :

$$\sum_{n} < SS_z | < LL_z | s^{\pm}_n \mathcal{Y}^{\circ}_{\nu}(\vartheta_n, \varphi_n) + \mathcal{Y}^{\circ}_{\nu}(\vartheta_n, \varphi_n)\, s^{\pm}_n | LL'_z > | SS'_z >$$

$$= \mp\, 2\sqrt{2} \sum_{n} < SS_z | < LL_z | \mathcal{S}^{\pm 1}_n \mathcal{Y}^{\circ}_{\nu}(\vartheta_n, \varphi_n) + \mathcal{Y}^{\circ}_{\nu}(\vartheta_n, \varphi_n) \mathcal{S}^{\pm 1}_n | LL'_z > | SS'_z > \qquad (1\text{-}70)$$

Ici $\mathcal{Y}^{\circ}_{\nu}$ et $\vec{\mathcal{S}}_n$ agissent dans deux multiplicités différentes et par conséquent l'élément de matrice ci-dessous devient :

$$\pm\, 2\sqrt{2} \sum_{n} < S \| \vec{\mathcal{S}}_n \| S > < L \| \vec{\mathcal{Y}}_\nu \| L > (-)^{S - S'_z} (-)^{L - L'_z} \frac{< SS_z S - S'_z | 1 \pm 1 > < LL_z L - L'_z | \nu\ 0 >}{\sqrt{3}\,(2\nu + 1)^{1/2}} \qquad (1\text{-}71)$$

Les deux éléments de matrice réduits ont déjà été calculés ; ce sont :

$$< S \| \vec{\mathcal{S}}_n \| S > = \frac{1}{n} \left[S(S + 1)(2S + 1) \right]^{1/2} \qquad (1\text{-}37)$$

$$< L \| \vec{\mathcal{Y}}_\nu \| L > = (2\nu + 1)^{1/2}\ G(l_1 \ldots l_n | \vec{\mathcal{Y}}_\nu | l_1 \ldots l_n) \qquad (1\text{-}41)$$

et au total l'élément de matrice de spin devient :

$$\mp \frac{2\sqrt{2}}{3} \left[S(S + 1)(2S + 1) \right]^{1/2} G(l_1 \ldots l_n | \vec{\mathcal{Y}}_\nu | l_1 \ldots l_n) (-)^{S - S'_z} (-)^{L - L'_z}$$

$$< SS_z S - S'_z | 1 \pm 1 > < LL_z L - L'_z | \nu\ 0 > \qquad (1\text{-}72)$$

b) Eléments de matrice orbital.

Les deux opérateurs tensoriels agissent dans la même multiplicité et l'on voit qu'il faut $S' = S_z$. On écrira, en introduisant l'opérateur $\vec{X}$

$$\sum_{n} < SS_z | < LL_z | l^{\pm}_n \mathcal{Y}^{\circ}_{\nu}(\vartheta_n, \varphi_n) + \mathcal{Y}^{\circ}_{\nu}(\vartheta_n, \varphi_n)\, l^{\pm}_n | LL'_z > | SS'_z > =$$

$$\mp\, 2\sqrt{2} \sum_{n} \Big\{ < 1 \pm 1\ \ \nu\ 0 | \nu - 1 \pm 1 > < LL_z | X^{\pm 1}_{\nu - 1} | LL'_z >$$

$$+ < 1 \pm 1\ \ \nu\ 0 | \nu \pm 1 > < LL_z | X^{\pm 1}_{\nu} | LL'_z >$$

$$+ < 1 \pm 1\ \ \nu\ 0 | \nu + 1 \pm 1 > < LL_z | X^{\pm 1}_{\nu + 1} | LL'_z > \Big\}\ \delta_{S_z S'_z} \qquad (1\text{-}73)$$

---

(1) Les limites de cette approximation sont liées à la grandeur du vecteur $\vec{k}$. Des cas particuliers seront discutés ultérieurement (Cf. Ch. II et III).

C'est-à-dire :

$$\sum_n \delta_{s_z s'_z} \sum_{p=-1}^{1} \mp \sqrt{2} \left\{ <1 \pm 1 \ \nu \ 0 \mid \nu + p \pm 1 > <L \| \vec{X}_{\nu+p} \| L > \frac{< LL_z L - L'_z \mid \nu + p \pm 1 >}{(2\nu + 2p + 1)^{1/2}} (-)^{L-L'_z} \right\} \quad (1\text{-}74)$$

Et compte tenu des valeurs des éléments de matrice réduits déjà calculés : (Eq. 1-52) :

$$\begin{aligned} &\sum_n <SS_z \mid <LL_z \mid l_n^{\pm} \ \mathcal{Y}_\nu^0(\vartheta_n, \varphi_n) + \mathcal{Y}_\nu^0(\vartheta_n, \varphi_n) \ l_n^{\pm} \mid LL'_z > \mid SS'_z > = \\ &\pm n \ \alpha_{\nu,\nu-1}^{l} \ G(l_1 \dots l_n \mid \vec{\mathcal{Y}}_{\nu-1} \mid l_1 \dots l_n)(-)^{L-L'_z} < LL_z L - L'_z \mid \nu - 1 \pm 1 > \\ &\pm n \ \alpha_{\nu,\nu+1}^{l} \ G(l_1 \dots l_n \mid \vec{\mathcal{Y}}_{\nu+1} \mid l_1 \dots l_n)(-)^{L-L'_z} < LL_z L - L'_z \mid \nu + 1 \pm 1 > \end{aligned} \quad (1\text{-}75)$$

En remarquant que :

$$(-)^{L-L'_z} < LL_z \ L - L'_z \mid \nu \ \alpha > = < LL_z \mid \mathcal{Y}_\nu^\alpha \mid LL'_z >$$

L'élément de matrice devient :

$$\begin{aligned} &< SS_z \mid <LL_z \mid P_t \mid LL'_z > \mid SS'_z > \\ &= \sum_\nu i^\nu \ A_\nu^t \ F_\nu^S(k) < SS_z \mid \mathcal{Y}_\nu^{\pm 1} \mid SS'_z > < LL_z \mid \mathcal{Y}_\nu^0 \mid LL'_z > \\ &+ \sum_\nu i^\nu \ B_{\nu,\nu-1}^t \ F_\nu^L(k) < LL_z \mid \mathcal{Y}_{\nu-1}^{\pm 1} \mid LL'_z > \delta_{s_z s'_z} \\ &+ \sum_\nu i^\nu \ B_{\nu,\nu+1}^t \ F_\nu^L(k) < LL_z \mid \mathcal{Y}_{\nu+1}^{\pm 1} \mid LL'_z > \delta_{s_z s'_z} \end{aligned} \quad (1\text{-}76)$$

On a posé :

$$A_\nu^{\pm} = G(1 \mid P_\nu \mid 1)(2\nu + 1) \left[\frac{\mp 2\sqrt{2}}{\sqrt{3}} \ [S(S+1)(2S+1)]^{1/2} \ G(l_1 \dots l_n \mid \vec{\mathcal{Y}}_\nu \mid l_1 \dots l_n) \right]$$

$$B_{\nu,\nu+1}^{+} = -B_{\nu,\nu+1}^{-} = \frac{n}{2} \ G(1 \mid P_\nu \mid 1)(2\nu + 1) \ \alpha_{\nu,\nu+1}^{l} \ G(l_1 \dots l_n \mid \vec{\mathcal{Y}}_{\nu+1} \mid l_1 \dots l_n)$$

c) Approximation d'ordre zéro.

Si le vecteur de diffusion $\vec{k}$ est assez petit, F_ν^S et F_ν^L sont peu $\neq 0$ pour $\nu > 0$, tandis que $F_\nu^S = F_\nu^L = 1$ pour $\nu = 0$. En négligeant les termes de $\nu > 0$ on voit que :

$$\begin{aligned} < SS_z \mid < LL_z \mid P_t \mid LL'_z > \mid SS'_z > = &\pm A_o^+ < SS_z \mid \mathcal{Y}_1^{\pm 1} \mid SS'_z > < LL_z \mid \mathcal{Y}_\nu^0 \mid LL'_z > F_o^S(k) \\ &\pm B_{o,1}^+ < LL_z \mid \mathcal{Y}_1^{\pm 1} \mid LL'_z > \delta_{s_z s'_z} \ F_o^L(k) \end{aligned}$$

et la section efficace aura la forme ; pour la transition 0, f :

$$\begin{aligned} \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{o,f} = H \Bigg| \sum_{\substack{L_z S_z \\ L'_z S'_z}} &A^{f*}_{L_z S_z} \ A^{o}_{L'_z S'_z} \Big[A_o^+ \leq SS_z \mid \mathcal{Y}_1^{\pm 1} \mid SS'_z >_1 \leq LL_z \mid \mathcal{Y}_\nu^0 \mid LL'_z >_1 F_o^S(k) \\ &+ B_{o,1}^+ \ _1 < LL_z \mid \mathcal{Y}_1^{\pm 1} \mid LL'_z >_1 \delta_{s_z s'_z} F_o^L(k) \Big] \Bigg|^2 \end{aligned}$$

$$H = \left(\frac{M_N e g_N}{2mc}\right)^2 \frac{p_f}{p_o} \quad (1\text{-}77)$$

Dans le cas d'un polycristal nous serons amenés à calculer :

$$\begin{aligned} < \frac{d\sigma}{d\Omega} >_{o,f} \simeq \frac{1}{8\pi^2} \int \Bigg| \sum_{\substack{S_z L_z \\ S'_z L'_z}} \Bigg(&\sum_r A^{f*}_{L_z S_z} \ A^{o}_{L'_z S'_z} \ A_o^+ \ D^1_{1,r} \frac{< SS_z \mid \mathcal{Y}_1^r \mid SS'_z >}{(2L+1)^{1/2}} \ \delta_{L_z L'_z} \ F_o^S(k) \\ &+ \sum_q A^{f*}_{L_z S_z} \ A^{o}_{L'_z S'_z} \ B_{o,1}^+ \ D^1_{1,q} < LL_z \mid \mathcal{Y}_1^q \mid LL'_z > \delta_{S_z S'_z} \ F_o^L(k) \Bigg) \Bigg|^2 d\omega \end{aligned} \quad (1\text{-}78)$$

ce qui, après une intégration classique, devient :

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{3} \sum_{o,f} H' \sum_{r=-1}^{1} \left\{ \left| A^{+} F_o^{S}(k) \left(\sum_{\substack{S_z L_z \\ S'_z L'_z}} A^{f*}_{S_z L_z} A^{o}_{S'_z L'_z} (-)^{S-S'_z} \frac{< SS_z S - S'_z | 1\ r >}{(2L+1)^{1/2}} \delta_{L_z L'_z} \right) \right.\right.$$

$$\left.\left. + B^{+}_{o,1} F_o^{L}(k) \left(\sum_{\substack{S_z L_z \\ S'_z L'_z}} A^{f*}_{S_z L_z} A^{o}_{S'_z L'_z} (-)^{L-L'_z} < LL_z L - L'_z | 1\ r > \delta_{S_z S'_z} \right) \right|^2 \right\} \qquad (1\text{-}79)$$

avec

$$H' = H \frac{e^{-E_o/k_B T}}{\sum_j e^{-E_j/k_B T}}$$

b) Formule de Schwinger.

Pour les valeurs du vecteur de diffusion très peu différentes de zéro l'opérateur $\vec{P}$ se réduit à :

$$\vec{P} \simeq \sum_n (\vec{l}_n + 2\vec{s}_n) = \vec{L} + 2\vec{S} \qquad (1\text{-}80)$$

A cette limite tout se passe comme pour la diffusion par un moment magnétique atomique :

$$\vec{M} \ \alpha \ \vec{L} + 2\vec{S}$$

C'est là une expression déjà donnée par Schwinger [5].

La section efficace correspondante sera, dans le cas général et pour une poudre, donnée par l'équation (1-79) où l'on fait $F_o^S(k)$ et $F_o^L(k)$ égaux à l'unité.

L'approximation de Schwinger présente cependant son plus grand intérêt lorsque l'on considère la diffusion des neutrons par des ions dont les états propres peuvent être définis à partir d'un seul nombre quantique $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$. On aura alors :

$$\vec{L} + 2\vec{S} = g_J \vec{J} \qquad (1\text{-}81)$$

La section efficace de diffusion par une poudre deviendra :

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \sum_{o,f} H' g_J^2 \left| \sum_{MM'} A^{f*}_{M} A^{o}_{M'} < JM | J + | J'M' > \right|^2 \qquad (1\text{-}82)$$

Si les $2J+1$ états possibles sont dégénérés, l'expression (1-2) vaudra :

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{2}{3} H g_J^2 J(J+1)$$

La mesure de la section efficace élastique pour un angle de diffusion nul permet une détermination directe de la valeur du moment magnétique.

CHAPITRE II

ÉTUDE DES IONS DE TERRES RARES

Résumé :

Dans ce chapitre est étudiée la diffusion des neutrons par les ions de terres rares dont la section efficace d'absorption est suffisamment petite. Trois cas sont envisagés :

a) Les ions peuvent être considérés comme libres ; ils sont dans le domaine paramagnétique. On calcule alors la variation de la section efficace avec la quantité $\sin\vartheta/\lambda$, ce qui fournit le facteur de forme. Si l'on choisit la fonction d'onde radiale sous la forme d'une fonction d'onde hydrogénoïde, on déduira le rayon de la couche 4f, par une comparaison du facteur de forme calculé avec le facteur de forme obtenu expérimentalement.

b) Les ions ne peuvent plus être considérés comme libres. Ils sont, dans le domaine paramagnétique, soumis à l'action d'un champ cristallin moyen. On calcule la section efficace de transition dans deux cas particuliers : un champ de symétrie cubique, un champ dont la symétrie est celle fournie par l'environnement en ions oxygènes dans les oxydes M_2O_3.

On montre que l'action du champ cristallin, qui décompose le niveau fondamental en sous-niveaux dont la distance extrême est de 1000 cm^{-1}, ne modifie que peu la section efficace totale, justifiant ainsi la détermination des rayons de la couche 4f, faite selon la méthode proposée à l'alinéa précédent.

c) Les ions peuvent être considérés comme polarisés, et l'on envisage les déviations à la loi bien connue $I = I_o \sin^2\beta$ où β est l'angle formé par le vecteur de diffusion et la direction de polarisation.

Généralités et plan du chapitre.

Dans ce chapitre nous étudions plus particulièrement la diffusion magnétique des neutrons par les ions de terres rares. Deux cas seront envisagés :

a) la diffusion par des poudres dans le domaine paramagnétique,

b) la diffusion par des poudres dans le cas où les ions magnétiques sont "polarisés".

Dans le premier cas nous nous attachons à l'étude de deux situations différentes.

Dans la première, l'effet du champ cristallin est nul. Le niveau fondamental de l'ion "libre" reste dégénéré. La diffusion est élastique. Nous étudions alors la variation de la section efficace avec le vecteur de diffusion. Cette étude n'est possible que si l'on fait une hypothèse sur la fonction d'onde radiale des électrons 4f. Nous avons choisi une fonction d'onde hydrogénoïde :

$$\Phi\ (r) \simeq r^3 e^{-r/2a}$$

où a est le rayon de la couche 4f. Il est clair que la variation de la section efficace avec le vecteur de diffusion, c'est-à-dire le facteur de forme, dépend du paramètre a. Koehler et Wollan [6] ont déterminé a en comparant les sections efficaces mesurées, dans les sesquioxydes de terres rares [1], aux sections efficaces des ions "libres" calculées pour diverses valeurs du paramètre. Cette comparaison n'a de sens en principe que si le niveau fondamental reste dégénéré.

C'est pourquoi nous avons examiné la seconde situation où la dégénérescence du niveau fondamental de l'ion "libre" est levée. Nous avons supposé que cette situation résulte de l'action d'un

---

(1) Cette détermination a été faite pour le néodyme, l'erbium et l'holmium.

champ cristallin effectif. Des transitions inélastiques entre les divers sous-niveaux issus du fondamental peuvent être induites par le neutron.

Nous avons calculé leur section efficace et, également, la section efficace élastique.

Ce calcul a été mené pour deux champs cristallins différents :

i) un champ cristallin de symétrie cubique

ii) un champ cristallin qui a la symétrie de l'environnement des ions magnétiques dans les sesquioxydes.

La section efficace totale, qui groupe les sections efficaces des transitions élastiques et inélastiques, dépend de l'énergie des neutrons incidents, de l'intensité du champ cristallin et de la température de l'échantillon. Nous avons pu montrer que, pour des neutrons de longueur d'onde incidente voisine de 1 Å, la section efficace totale, à l'exception du cérium et du praséodyme, varie peu avec la température et est peu différente de la section efficace calculée pour un ion libre même pour des distances entre les niveaux extrêmes de l'ordre de 1000 cm^{-1}. La détermination de Koehler et Wollan, qui utilise de tels neutrons, est correcte bien que la présence du champ cristallin ait levé la dégénérescence du niveau fondamental.

D'autre part l'ordre de grandeur trouvé pour les sections efficaces des transitions inélastiques montre que leur détection expérimentale est possible ce qui suggère une méthode de mesure directe des effets du champ cristallin. Nous avons donc calculé ces sections efficaces pour des neutrons incidents de longueur d'onde 4,35 Å afin de pouvoir comparer les résultats de ce calcul avec les déterminations expérimentales menées dans les sesquioxydes de terres rares par D. Cribier et B. Jacrot [13].

Enfin, nous nous sommes attachés à l'étude du second cas signalé plus haut, c'est-à-dire à l'étude du facteur de forme dans le cas où les ions magnétiques peuvent être considérés comme polarisés. On sait que, dans le cas où le moment orbital est bloqué, le facteur de forme est proportionnel à $\sin^2\beta$, β étant l'angle entre le vecteur de diffusion et la direction de polarisation (direction des spins). Nous montrons que, dans le cas des terres rares où le moment orbital n'est plus bloqué, cette forme, que l'on utilise généralement, ne constitue qu'une approximation valable pour les vecteurs de diffusion très petits. Nous examinons le domaine de validité de cette approximation.

En résumé le chapitre II sera divisé de la façon suivante :

1) Formule générale de la section efficace magnétique dans le cas des terres rares.

a) Etat fondamental des ions de terres rares.

b) Section efficace.

2) Applications de la formule générale.

a) Poudres cristallines dans le domaine paramagnétique.
Champ cristallin nul.
Détermination du rayon de la couche 4f.
Champ cristallin non nul.
Champ cristallin de symétrie cubique.
Etude de la section efficace totale et des sections efficaces inélastiques.
Champ cristallin des sesquioxydes.
Etude des sections efficaces totale et inélastiques.
Discussion de la détermination de Koehler et Wollan.
Comparaison avec les déterminations expérimentales de Cribier et Jacrot.

b) Ions magnétiques polarisés.
Etude du facteur de forme.

I - FORMULE GENERALE DE LA SECTION EFFICACE DANS LE CAS DES TERRES RARES -

Nous allons d'abord dégager les caractères généraux communs à tous les ions de terres rares et en déduire la forme des fonctions d'onde des niveaux d'énergie de ces divers ions. Nous en déduirons la forme générale de la section efficace que nous pourrons utiliser dans tous les cas particuliers que nous étudierons.

a) Etat fondamental des ions de terres rares.

Le caractère commun à tous les ions trivalents de terres rares est la présence d'une couche incomplète 4f, responsable des propriétés magnétiques. Cette couche peut contenir au plus quatorze électrons soumis au couplage Russell-Saunders et obéissant à la règle de Hund.

Nous pourrons, pour un nombre d'électrons inférieur à sept, raisonner sur les électrons et, pour un nombre supérieur, sur les trous. La demi-couche, (n = 7), correspond à un état S.

Le nombre quantique orbital de chaque électron (ou trou) peut prendre une des sept valeurs :

$$3,\ 2,\ 1,\ 0,\ -1,\ -2,\ -3.$$

La règle de Hund, nous contraint à rechercher le plus grand spin possible pour l'ion. On obtiendra celui-ci en attribuant à chaque électron (ou trou) le spin maximal (1/2) puis le plus grand moment orbital compatible avec le principe d'exclusion de Pauli. Le terme spectroscopique sera donc défini par :

$$S = n/2$$

$$L = \sum_{p=0}^{n} (3 - p)$$

où n est le nombre d'électrons (ou de trous).

La dégénérescence de ce terme sera :

$$(2L + 1)(2S + 1).$$

Le deuxième caractère commun aux ions de terres rares est la présence d'un fort couplage spin-orbite $\lambda \vec{L}.\vec{S}$ insuffisant cependant pour rompre le couplage Russell-Saunders et abolir la règle de Hund. $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$ est alors un bon nombre quantique et le terme L S se sépare en multiplets successifs caractérisés par les valeurs de J :

$$|L - S| \leqslant J \leqslant L + S.$$

Deux ions sont dits complémentaires si le nombre des électrons de l'un est égal au nombre de trous de l'autre. Ils possèdent le même terme L S, et le couplage spin-orbite fournit l'état fondamental :

$J = L - S$ pour l'ion possédant les électrons

et $J = L + S$ pour l'ion possédant les trous.

Citons à titre d'exemple les deux ions complémentaires Nd^{+++} et Er^{+++} qui possèdent respectivement trois électrons et trois trous.

Le terme spectroscopique est :

$$(\overset{+}{3}\ \overset{+}{2}\ \overset{+}{1}),\quad L = 6,\quad S = 3/2 \qquad \text{c'est-à-dire } {}^4I$$

de dégénérescence 52.

Les niveaux fondamentaux seront donc :

$$J = 9/2 \quad \text{pour} \quad Nd^{+++} \quad \text{et} \quad J = 15/2 \quad \text{pour} \quad Er^{+++}$$

Dans le tableau II-1 sont reportés, pour l'ensemble des ions trivalents de terres rares, le terme spectroscopique, le niveau fondamental J et la distance de celui-ci au niveau J ±1 immédiatement supérieur. On voit que ces distances sont grandes à l'exception des cas bien connus du samarium et de l'europium.

Comme nous voulons étudier la diffusion paramagnétique des neutrons, il est bon de se préoccuper de la section efficace d'absorption [1]. Leur examen prouve que seuls le cérium, le praséodyme, le néodyme, l'holmium et l'erbium présentent un intérêt neutronique. C'est à ces cinq corps que nous avons consacré l'étude qui suit :

b) Section efficace pour un ion de terre rare.

Si nous supposons que les interactions que subissent les ions paramagnétiques sont suffisamment faibles pour ne pas induire de transition entre états de J successifs, un état quelconque d'un tel ion pourra être écrit : $\sum_M A_M^J |JM>$.

---

(1) Ces sections efficaces sont reportées dans le tableau II-1.

Les énergies des neutrons auxquels nous nous intéressons sont trop faibles pour induire des transitions entre niveaux de nombres quantiques J différents. C'est la raison pour laquelle les formes de la section efficace, que nous avons données au chapitre I, seront utilisées en égalant partout J à J'. Les indices J' et J ne font qu'alourdir l'écriture, nous les supprimerons.

Dans une remarque du chapitre I nous avons montré que (1) :

$$\mathcal{B}_\nu (J, J) = 0.$$

La section efficace devient :

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{2} H' \left\{ \left| \sum_{M',M} A^{f*}_{M',J} A^{o}_{M,J} \sum_{\nu=0}^{3} (-)^{\nu} [\alpha_\nu - \mathcal{B}_{\nu+1}]_1 < JM' | \mathcal{Y}^{1}_{2\nu+1} | JM >_1 \right|^2 \right.$$

$$\left. + \left| \sum_{M',M} A^{f*}_{M',J} A^{o}_{MJ} \sum_{\nu=0}^{3} (-)^{\nu} [\alpha_\nu - \mathcal{B}_{\nu+1}]_1 < JM' | \mathcal{Y}^{-1}_{2\nu+1} | JM >_1 \right|^2 \right\} \qquad (2\text{-}1)$$

Les équations de définition de α_ν et $\mathcal{B}_\nu$ ont été établies au chapitre I (équations (1-62), (1-63), (1-64)). Les diverses quantités apparaissant dans ces équations ont également été définies au chapitre I. Leurs relations de définition sont reportées dans le tableau I.

Pour le calcul de ces quantités intermédiaires nous avons utilisé le programme de calcul des coefficients 9j, 6j, 3j qui a été écrit par le groupe de calcul électronique de Saclay. Les valeurs finales sont reportées dans les tableaux II-2. Pour établir ces tableaux, on a tenu compte du fait que, pour la couche 4f, : l = 3, et on a utilisé les valeurs de LSJ données dans le tableau II-1. Les indices J ont été omis dans l'écriture des diverses quantités chaque fois qu'il n'y avait pas ambiguïté.

Remarques sur les tableaux II-2 :

Ces tableaux sont les mêmes que les tableaux correspondants donnés par S. Odiot et D. Saint-James [2]. Le calcul a cependant été mené ici à partir des formules du chapitre I et non à partir de celles données dans l'article précédent. Trammell [1] avait calculé les coefficients pour les ions Nd^{+++} et Er^{+++}. Ses résultats diffèrent des nôtres pour $\nu > 1$. Une erreur semble s'être glissée dans ses calculs.

II - APPLICATIONS DE LA FORMULE GENERALE :

Comme nous l'avons dit dans les généralités, nous allons envisager deux cas bien particuliers :

a) celui des poudres dans le domaine paramagnétique.

b) celui où les ions magnétiques peuvent être considérés comme polarisés.

a) Poudre cristalline dans le domaine paramagnétique avec ou sans champ cristallin.

Nous sommes amenés, dans ce cas, à calculer la valeur moyenne de la section efficace. Cette moyenne doit être prise sur toutes les orientations des cristallites. Soit $(\omega) = (\alpha, \beta, \gamma)$ les angles d'Euler définissant la rotation qui amène le référentiel du vecteur de diffusion $\vec{k}$ sur le référentiel lié au cristallite. On écrira :

$$\mathcal{Y}^{\pm 1}_{2\nu+1} (\vec{k}) = \sum_{q'=-(2\nu+1)}^{2\nu+1} \mathcal{D}^{2\nu+1}_{q',\pm 1}(\omega) \; \mathcal{Y}^{q'}_{2\nu+1}$$

Si l'on tient compte des propriétés d'orthogonalité des coefficients de Glebsch-Gordon et des propriétés d'unitarité des matrices de rotation, il vient (Cf. : eq. (1-67)) :

---

(1) Voir page 17 ; note (1).

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{M_N e\, g_N}{2mc}\right)^2 \sum_{o,f} \frac{p_f}{p_o} \frac{e^{-\varepsilon_o/k_B T}}{\sum_j \exp\left[-E_j/k_B T\right]} \sum_{\nu=o}^{l} \left| \mathcal{A}_\nu - \mathcal{B}_{\nu+1} \right|^2 \frac{\mathcal{C}_\nu(f,0)}{4\nu+3} \qquad (2\text{-}2)$$

expression où l'on a posé :

$$\mathcal{C}_\nu(f,0) = \sum_{q=-(2\nu+1)}^{2\nu+1} \left| \langle \Psi_f \left| \mathcal{Y}^q_{2\nu+1} \right| \Psi_o \rangle \right|^2 \qquad (2\text{-}2b)$$

α) Champ cristallin nul.

Dans ce cas le niveau fondamental J reste dégénéré. $M = J_z$ est un bon nombre quantique. On pourra poser :

$$\Psi_o = |JM\rangle \quad \Psi_f = |JM'\rangle, \quad p_f = p_o, \quad E_o = E_j = 0$$

et comme :

$$\sum_{f,o} \frac{e^{-\varepsilon_o/k_B T}}{\sum_j \exp\left[-E_j/k_B T\right]} \mathcal{C}_\nu(f,0) = \frac{4\nu+3}{2J+1}$$

la section efficace prend la forme très simple :

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{M_N e\, g_N}{2mc}\right)^2 \sum_{\nu=o}^{l} \frac{\left| \mathcal{A}_\nu(k) - \mathcal{B}_{\nu+1}(k) \right|^2}{2J+1} \qquad (2\text{-}3)$$

Approximation d'ordre zéro.

Pour $k = 0$, $\mathcal{A}_o(k)$ se réduit à : $\mathcal{G}^L_{o,1} + \mathcal{G}^S_{o,1}$. Les autres termes intervenant dans l'expression (2-3) sont nuls. La section efficace se réduit à :

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{M_N e\, g_N}{2mc}\right)^2 \frac{\left(\mathcal{G}^L_{o,1} + \mathcal{G}^S_{o,1}\right)^2}{2J+1} \qquad (2\text{-}4a)$$

Cette expression est l'équivalent de la formule de Schwinger (Cf. chapitre I eq. (1-81)) qui prend ici la forme :

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{M_N e\, g_N}{2mc}\right)^2 \frac{2}{3} g_J^2 J(J+1) \qquad (2\text{-}4b)$$

où le facteur de Landé g_J défini par :

$$\vec{L} + 2\vec{S} = g_J \vec{J}$$

est donné par l'expression bien connue :

$$g_J = 1 + \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)}$$

On voit, que pour la diffusion à angle nul, on obtient une expression équivalente à celle de Halpern et Johnson :

$$g_S^2 S(S+1)$$

où S est remplacé par J.

Dans le tableau II-3, nous avons reporté les valeurs de g_J pour les cinq terres rares étudiées et la valeur de la section efficace correspondante pour $k = 0$. On vérifierait aisément, à l'aide du tableau II-2, que les formules (2-4a) et (2-4b) mènent au même résultat [1].

Facteur de forme.

Si k est différent de zéro, nous allons devoir tenir compte de la variation avec $\vec{k}$ de $F_o^S(k)$ et $F_o^L(k)$ et éventuellement introduire les termes d'ordre ν supérieur.

Pour faire un calcul quantitatif il faut posséder une forme explicite des fonctions radiales de la couche 4f qui apparaissent dans la définition des facteurs de forme $F_{2\nu}^S$ et $F_{2\nu}^L$.

Pour des raisons de simplicité de calcul, nous choisissons avec Trammel une fonction hydrogénoïde correspondant à cette couche :

$$\Phi_{4f} \simeq r^3 e^{-r/2a} \tag{2-5}$$

On pourra utiliser le rayon de la couche, a, pour définir une charge effective :

$$Z^* = 2\, a_o/a$$

où a_o est le rayon de l'orbite de Bohr (0,529 Å).

Les intégrales donnant $F_{2\nu}^S$ et $F_{2\nu}^L$ (Cf. éq. (1-20)) peuvent être calculées explicitement. Trammell a fourni un tableau de valeurs numériques de ces fonctions, mais un certain nombre d'erreurs rend l'utilisation de ces tableaux incertaine pour les grandes valeurs de ν en général et pour certaines valeurs particulières du paramètre $\xi = k^2a^2$. C'est pourquoi nous donnons ci-dessous leur forme explicite en fonction du même paramètre.

$$F_o^L = \left(1 - \frac{1}{2}\xi + \frac{3}{2}\xi^2 + \frac{5}{4}\xi^3 + \frac{3}{4}\xi^4 + \frac{1}{4}\xi^5 + \frac{1}{28}\xi^6\right)(1+\xi)^{-7}$$

$$F_2^L = \left(3\xi + \frac{15}{7}\xi^2 + \frac{5}{2}\xi^3 + \frac{3}{2}\xi^4 + \frac{1}{2}\xi^5 + \frac{1}{14}\xi^6\right)(1+\xi)^{-7}$$

$$F_4^L = \frac{2}{21}\,(44\xi^2 + 35\xi^3 + 21\xi^4 + 7\xi^5 + \xi^6)(1+\xi)^{-7}$$

$$F_6^L = 4\left(\xi^3 + \frac{3}{5}\xi^4 + \frac{1}{5}\xi^5 + \frac{1}{35}\xi^6\right)(1+\xi)^{-7} \tag{2-6}$$

$$F_o^S = (1 - 7\xi + 7\xi^2 - \xi^3)(1+\xi)^{-8}$$

$$F_2^S = \left(6\xi - \frac{60}{7}\xi^2 + \frac{10}{7}\xi^3\right)(1+\xi)^{-8}$$

$$F_4^S = \frac{8}{7}\,(11\xi^2 - 3\xi^3)(1+\xi)^{-8}$$

$$F_6^S = 16\,\xi^3\,(1+\xi)^{-8}$$

---

(1) D'après le tableau 1 on a :

$$\mathcal{G}^L_{0,1} = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{2}{3}}\sqrt{\frac{2J+1}{J(J+1)}}\left[J(J+1) + L(L+1) - S(S+1)\right] = \sqrt{\frac{2}{3}}\sqrt{\frac{2J+1}{J(J+1)}}\;\vec{L}.\vec{J}$$

$$\mathcal{G}^S_{0,1} = \sqrt{\frac{2}{3}}\sqrt{\frac{2J+1}{J(J+1)}}\left[J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)\right] = 2\sqrt{\frac{2}{3}}\sqrt{\frac{2J+1}{J(J+1)}}\;\vec{S}.\vec{J}$$

ces valeurs conduisent bien à l'expression de Schwinger (2-4b).

Sur la figure II-1 nous avons traçé la variation de ces fonctions avec le paramètre $\xi^{1/2}$.

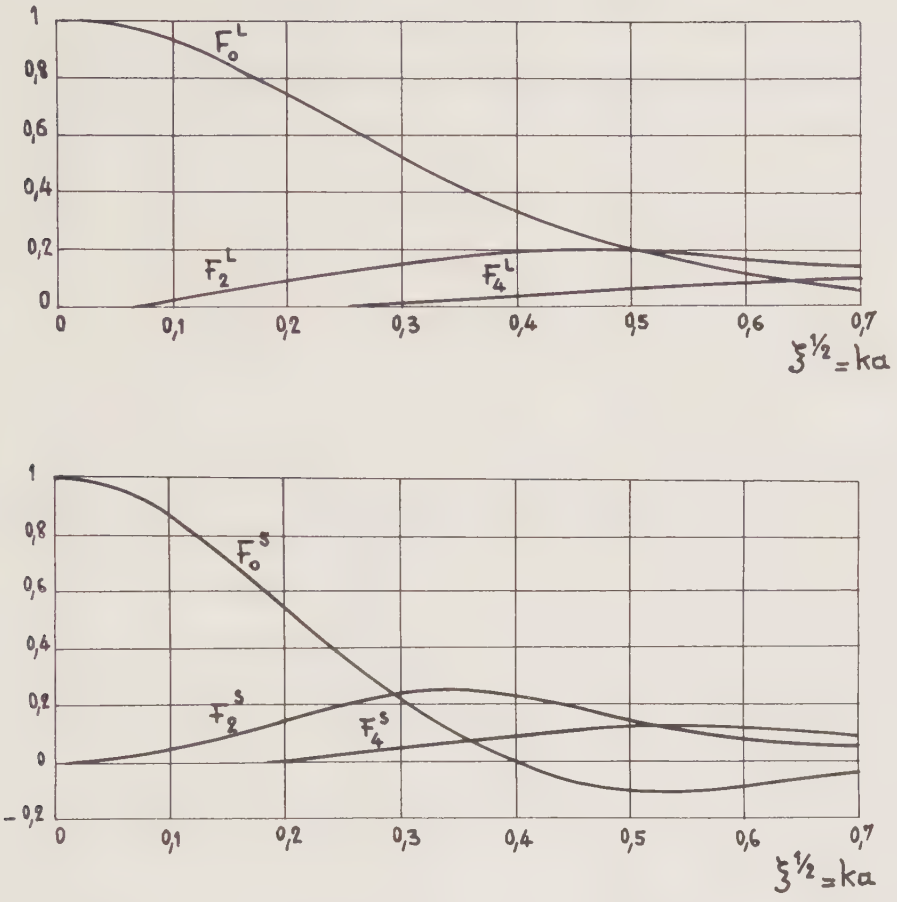


Figure II-1 - Variation des facteurs de forme.

Mesure expérimentale du rayon de la couche 4f.

La connaissance du paramètre a, "rayon" de la couche 4f, est indispensable pour obtenir la variation de la section efficace avec le vecteur de diffusion $\vec{k}$, c'est-à-dire le facteur de forme. A l'inverse on peut remonter, à partir d'une courbe expérimentale donnant le facteur de forme, à la valeur de a (c'est-à-dire de Z^*) donnant la meilleure courbe théorique en accord avec la détermination expérimentale. C'est là le principe d'une détermination expérimentale du rayon de la couche 4f des terres rares due à W.C. Koehler et O. Wollan [6](voir également la thèse de W.C. Koehler [7]).

Les déterminations ont porté sur les ions Nd^{+++} et Er^{+++}. Nous renvoyons aux auteurs pour l'étude des dispositifs expérimentaux et pour l'évaluation des contributions, autres que magnétiques, à la section efficace.

La comparaison des courbes expérimentales et théoriques permettent d'attribuer les charges effectives (1) :

---

(1) Ces valeurs sont en assez bon accord avec celles mesurées par des méthodes optiques (Cf. Van Vleck Electric and Magnetic susceptibilities p.247 et s., Oxford University Press 1952).

$Z^* = 20$ pour le néodyme

$Z^* = 23$ pour l'erbium,

ce qui conduit à des rayons très petits, de l'ordre de 0,05 Å, résultat qui est de l'ordre de grandeur de celui attendu.

Cependant les courbes expérimentales et théoriques sont en mauvais accord pour les grandes valeurs de $\sin \vartheta/\lambda$. Ceci prouve que les fonctions hydrogénoïde sont une mauvaise approximation de la fonction d'onde radiale.

En extrapolant et intrapolant ces résultats pour les quatre terres rares étudiées ici, nous avons choisi les valeurs suivants de Z^* :

19,4 pour Ce^{+++}

19,7 pour Pr^{+++}

20 pour Nd^{+++}

22,6 pour Ho^{+++}

23 pour Er^{+++}

Ces valeurs ont été utilisées pour évaluer la variation de la section efficace avec le vecteur de diffusion. Comme la diffusion est élastique, nous avons choisi le paramètre habituel :

$$\sin \vartheta / \lambda = k\, a\, Z^*/8\pi a_o$$

où 2ϑ est l'angle de diffusion.

Les variations des section efficaces sont reportées sur les figures II-2.

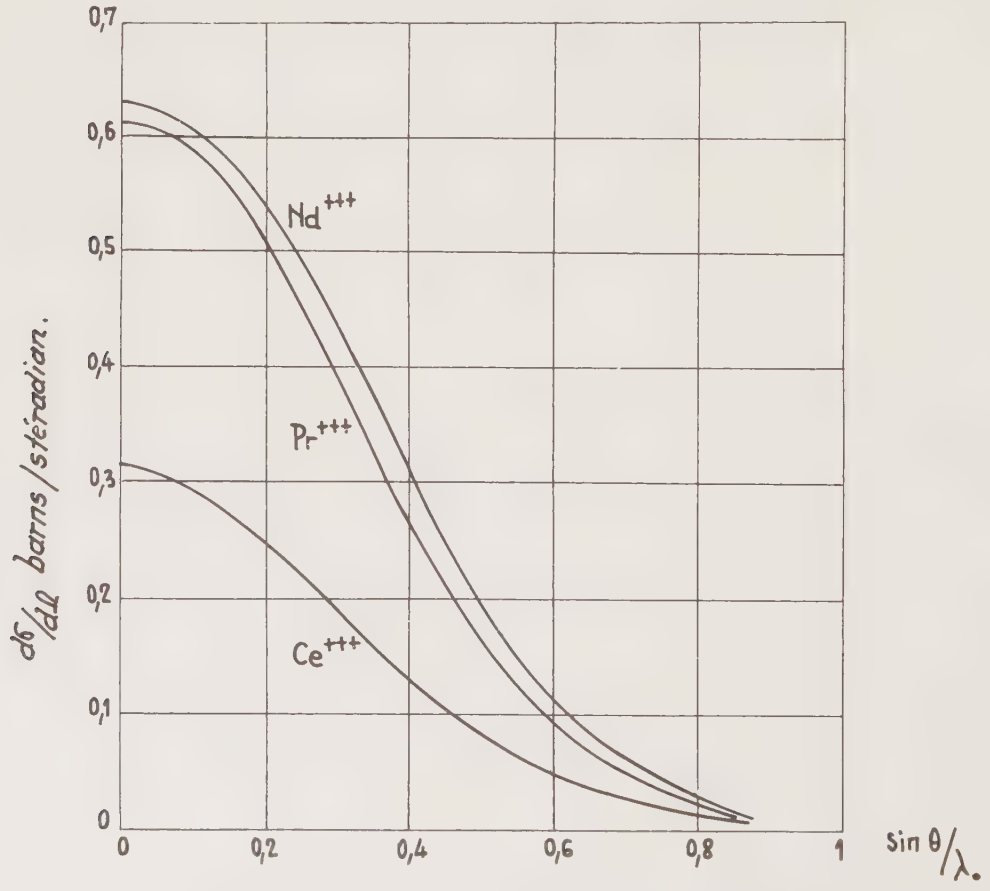


Figure II-2-a - Section efficace de l'ion sans interaction.

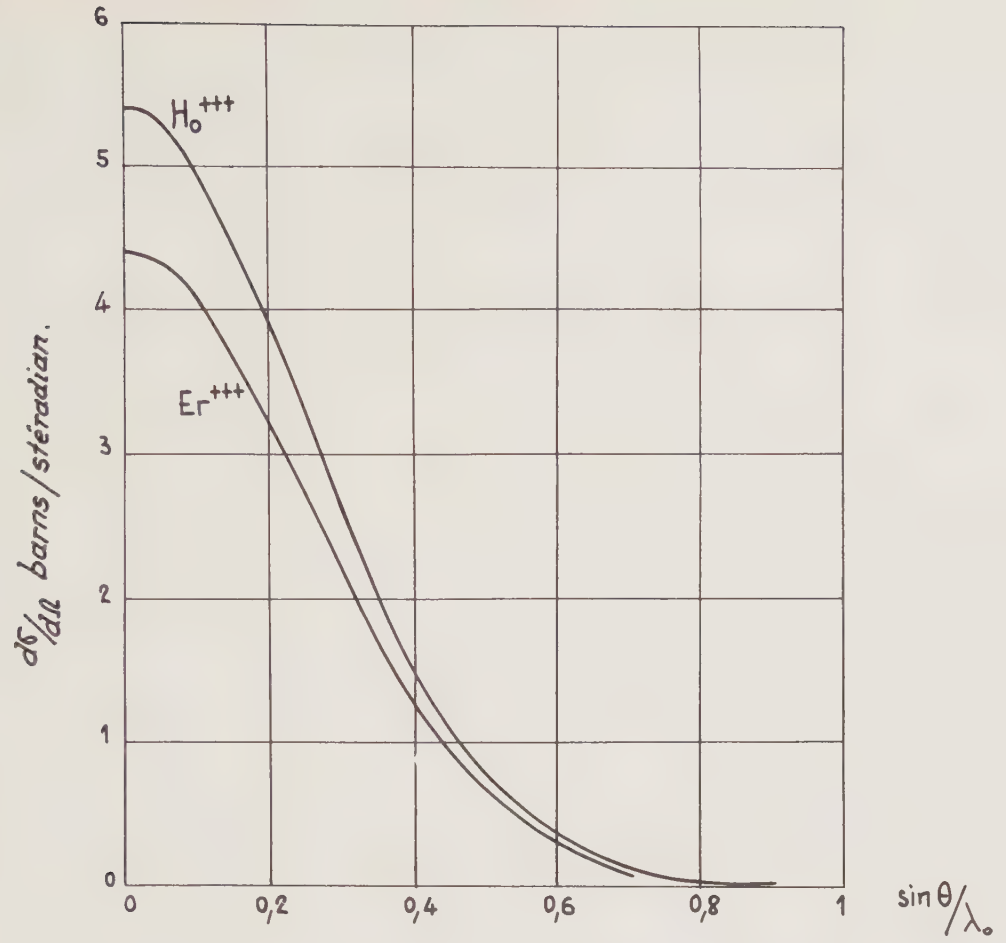


Figure II-2-b - Section efficace de l'ion sans interaction.

Discussion préliminaire de la détermination de Koehler et Wollan.

Koehler et Wollan ont choisi pour leurs déterminations des composés qui ont une forte proportion d'atomes magnétiques. Ce choix est restreint par le fait qu'il faut disposer d'un corps paramagnétique à la température ambiante. Les corps tels que les éthyl-sulfates, qui ont servi aux études de résonance magnétique électronique, ne peuvent être utilisés que sous leur forme deutérée et, de plus, la concentration en ions de terre rare n'est pas très favorable. Le choix s'est donc porté sur les sesquioxydes Nd_2O_3, Er_2O_3 et Ho_2O_3. Ces sesquioxydes ont un comportement paramagnétique normal qui, dans une zone de températures allant de 80°K à 300°K environ, est bien représenté par une loi de Curie-Weiss :

$$\chi = \frac{C}{T + \Delta} \qquad (2\text{-}7)$$

Δ est de l'ordre de quelques dizaines de degrés (59°K pour Nd_2O_3, 15°K pour Er_2O_3) tandis que le nombre de magnétons de Bohr par atome est en bon accord avec la valeur théorique de Van Vleck :

$$g_J\sqrt{J(J+1)} \qquad (2\text{-}8)$$

Il n'existe, d'autre part, que peu ou pas d'ordre entre ions magnétiques voisins, sauf, peut-être, à des températures très basses (de l'ordre de quelques degrés K).

Mais la détermination de Koehler et Wollan ne peut avoir de sens que si l'on suppose que le niveau fondamental J reste dégénéré dans le solide, c'est-à-dire si l'on néglige les effets de champ cristallin. Pour étayer cette hypothèse, Koehler (1) a étudié la variation de la section efficace avec la température. Si la dégénérescence est levée par les interactions cristallines, seul le sous-niveau fondamental sera peuplé à basse température et l'on s'attend à une baisse de la section efficace. Cette diminution n'a pas été constatée expérimentalement, du moins la variation de la section efficace n'excède pas 10 % et il est peu raisonnable, a priori, de l'attribuer aux effets de champ cristallin.

On sait cependant que les effets du champ cristallin sur le niveau J ne sont pas du tout négligeables dans le cas des éthylsulfates (Cf. Stevens [8]) ou des sulfates (Cf. Kynch [9]). Il n'y a aucune raison pour qu'ils soient très inférieurs dans le cas des sesquioxydes. Il devient donc nécessaire, dans ces conditions, d'envisager de plus près les variations de la section efficace, compte tenu de la séparation du niveau J en sous-niveaux.

β) Champ cristallin non nul.

Plan général de cette étude.

Nous avons voulu traiter deux cas.

Le premier est purement académique, son intérêt étant lié à la simplicité relative des calculs ; il s'agit d'étudier le comportement d'un ion de terre rare placé dans un environnement d'ions négatifs de symétrie cubique.

Le deuxième cas envisagé est celui d'un environnement présentant la symétrie des sesquioxydes eux-mêmes. Un calcul quantitatif peut être effectué, les résultats seront examinés ci-après.

Cas du champ de symétrie cubique.

Nous allons supposer que l'influence des voisins non magnétiques de l'ion de terre rare sera bien représentée par un champ cristallin électrostatique effectif. La caractéristique essentielle de ce champ sera son invariance par les opérations de symétrie d'un certain groupe ponctuel de symétrie. Nous allons envisager les conséquences de cet état de fait sur le multiplet J. Des dégénérescences seront levées et certains états $|JM>$ seront mélangés. M cesse d'être un bon nombre quantique. Pour ne pas compliquer exagérément la situation, nous supposerons que les effets du champ cristallin sont insuffisants pour déterminer des mélanges entre multiplets J successifs. Le champ cristallin reste négligeable devant l'interaction spin-orbite.

Dans le langage de la théorie des groupes le multiplet J correspond à une représentation D^J du groupe des rotations, irréductible dans le cas d'un ion libre. Les fonctions propres $|JM>$ forment une base pour la représentation D^J. La symétrie du champ cristallin étant inférieure à la symétrie sphérique de l'ion libre, D^J sera réduite en un certain nombre de représentations irréductibles du groupe de symétrie correspondant au potentiel cristallin considéré. Le multiplet J se scinde en un certain nombre de multiplets dont les états propres peuvent servir de base à la représentation irréductible du groupe qui leur correspond.

Le potentiel cristallin pourra être pris sous la forme :

$$V_{cr} = \sum_{B} \sum_{n} \frac{\alpha_B e^2}{|\vec{r}_B - \vec{r}_n|} \qquad (2\text{-}9)$$

expression dans laquelle $\vec{r}_n$ représente la position du $n^{ième}$ électron de la couche incomplète de l'ion de terre rare A, $\vec{r}_B$ la position de l'ion non magnétique voisin de A, α_B est un paramètre qui, en général, sera pris égal à la valence polaire de l'ion B. On pourrait éventuellement le considérer comme un paramètre phénoménologique à adapter au mieux pour cadrer avec les niveaux d'énergie observés. L'origine des coordonnées est le centre de l'ion A, la sommation est étendue à tous les ions B de l'entourage de A (nous la bornerons ici aux premiers voisins de A) et à tous les électrons de la couche incomplète de A.

Comme $r_n << r_B$ on pourra développer V_{cr} en série de :

---

(1) Communication privée.

$$\frac{r_n}{r_\beta} x_n, \qquad \frac{r_n}{r_\beta} y_n, \qquad \frac{r_n}{r_\beta} z_n$$

où x_n, y_n, z_n sont les cosinus directeurs de $\vec{r}_n$.

L'expression de V_{cr} prend la forme :

$$V_{cr} = \sum_\beta \sum_n \sum_k \sum_{m,p,q} A^{mpq}_{k\beta(n)} x_n^m y_n^p z_n^q . \qquad (m+p+q = k) \qquad (2\text{-}10)$$

Dans l'appendice II, qui reproduit en partie un article de F. Boutron et D. Saint-James [10], on démontre que, dans l'expression (2-10), il n'est nécessaire de retenir que les termes de k pairs et tels que $k \leqslant 2l$ où l est le nombre quantique correspondant à la couche considérée. (ici $l = 3$).

C'est la raison pour laquelle on ne considère pas les opérations de symétrie par rapport à un centre et qu'on se borne, pour V_{cr}, aux groupes ne possédant pas l'inversion.

La succession des niveaux sera donnée par la résolution de l'équation séculaire :

$$\det |<JM\,|V_{cr}|\,JM'> - E <JM\,|JM'>| = 0 . \qquad (2\text{-}11)$$

La résolution de cette équation ne mène pas à des niveaux quelconques. Ils correspondent en fait à la décomposition de D^J en représentations irréductibles du groupe $\mathcal{G}_p$.

Le calcul des éléments de matrice est grandement facilité si on utilise un équivalent opératoriel du champ cristallin V_{cr} (1)

$$V_{cr} \simeq \sum_\beta \sum_k A^k_\beta <J \,\|\, \mathcal{J}_k \,\|\, J> \sum_{\substack{mpq \\ (m+p+q=k)}} \left\{ J_x^m\, J_y^p\, J_z^q \right\} b_k^{mpq} \qquad (2\text{-}12)$$

Le terme entre accolades représente par définition la somme des $k!/m!\,p!\,q!$ façons d'écrire le produit $J_x^m\, J_y^p\, J_z^q$, que l'on doit introduire pour tenir compte de la non-commutation des diverses composantes de J. $<J \,\|\, \mathcal{J}_k \,\|J>$ est l'équivalent d'un élément de matrice réduit. Il ne dépend que de k et, bien entendu, est fonction de la manière dont est formé le moment cinétique J. En particulier, il est nul si k est impair. Son calcul est analogue à celui des éléments de matrice réduits que nous avons mené au chapitre I (Cf. appendice II (2).

Une fois les éléments de matrice de V_{cr} calculés, on résoudra l'équation séculaire (2-11), mais on pourra guider ce travail par des considérations de théorie des groupes.

En effet les racines obtenues ne peuvent être quelconques : elles doivent correspondre à la réduction de la représentation D^J en représentations irréductibles de $\mathcal{G}_p$ si J est entier et en représentations irréductibles du groupe double $\mathcal{G}_p^+$ si J est demi-entier (3). C'est-à-dire :

$$D^J = \sum_{j=1}^{L} n_j G^j \qquad (2\text{-}13)$$

équation où la sommation est étendue aux L représentations irréductibles de $\mathcal{G}_p$ ou de $\mathcal{G}_p^+$. (Cf. appendice III).

La résolution de (2-11) fera apparaître en tout $\sum_{j=1}^{L} n_j$ racines distinctes qui se grouperont en n_1 racines de multiplicité d_1, n_2 de multiplicité d_2 etc. et, au total :

$$2J + 1 = \sum_{j=1}^{L} n_j d_j \qquad (2\text{-}14)$$

Chacune des n_j racines de multiplicité d_j correspond à un état de dégénérescence d_j dont les d_j fonctions propres peuvent servir de base à la représentation irréductible G^j. C'est pourquoi nous repèrerons ces états par la notation :

$$\Gamma^j(n) \qquad (n = 1, 2 \ldots n_j)$$

---

(1) Cette méthode d'équivalence est due à Stevens [11]. Elle est exposée avec plus de généralité dans l'appendice II et dans le rapport de F. Boutron et D. Saint-James déjà cité [10].

(2) Dans l'opération de symétrie autour de l'origine les termes impairs du développement (2-10) changent de signe ; il n'en est pas de même pour ceux du développement (2-12). L'élément de matrice réduit $<J \,\|\, \mathcal{J}_k \,\|J>$ est donc nul pour k impair.

(3) Voir appendice III.

Si l'on connaissait a priori des combinaisons des états $|JM>$ pouvant servir de base à la représentation G^j, la solution de l'équation (2-11) serait grandement facilitée. Dans l'appendice on expose une méthode due à Wigner [12] qui permet de former de telles combinaisons et l'on montre que l'on peut former au plus n_j ensembles de d_j combinaisons linéairement distinctes. Choisissons les n_j fonctions $\gamma^{\dagger}_{j,n}$ $(n = 1, \ldots n_j)$ qui jouent le même rôle dans chacun des ensembles d_j. Nous pouvons affirmer que le potentiel cristallin n'aura pas d'éléments de matrice entre fonctions γ d'indices i, j et i', j' différents ; autrement dit :

$$< \gamma^{\dagger}_{j,n} \mid V_{cr} \mid \gamma^{\dagger'}_{j',n} > = 0 \qquad \text{si} \qquad j \neq j' \qquad \text{ou} \qquad i \neq i'. \tag{2-15}$$

l'équation (2-11) pourra être factorisée en équations de la forme :

$$\det \; <\gamma^{\dagger}_{j,n} | V_{cr} | \gamma^{\dagger}_{j,n'} > - \; E \; <\gamma^{\dagger}_{j,n} \mid \gamma^{\dagger}_{j,n'} >| = 0 \tag{2-16}$$

équation qui n'est que de degré n_j.

La résolution d'une équation de degré $2J + 1$ est donc ramenée à celles de L équations de degrés respectifs n_j $(j = 1, 2, \ldots L)$ (1).

Remarque sur le développement (2-13) :

Une dernière remarque peut être faite en ce qui concerne les représentations irréductibles qui peuvent apparaître dans le développement (2-13).

Si $\mathcal{G}_p$ est un groupe qui contient l'inversion, ses N éléments peuvent être groupés en deux sous-ensembles de $N/2$ éléments. Le premier de ces sous-ensembles forme un sous-groupe $\mathcal{G}_{p'}$ de $\mathcal{G}_p$ qui ne contient pas l'inversion. Le second, qui ne forme pas un groupe, est l'ensemble $I\mathcal{G}_{p'}$. Les représentations de $\mathcal{G}_p$ se divisent également en deux-sous ensembles :

celles pour lesquelles :

$$\chi(g) = \chi(Ig) \qquad g \in \mathcal{G}_{p'},$$

et celles pour lesquelles :

$$\chi(g) = -\chi(Ig) \qquad g \in \mathcal{G}_{p'},$$

Les représentations du premier ensemble peuvent être considérées comme représentations de $\mathcal{G}_{p'}$. (En fait les deux ensembles de représentations dégénèrent).

Comme dans V_{cr} nous n'avons retenu que les termes de degré pair, l'inversion ne joue aucun rôle. Il s'ensuit que, dans la décomposition de D^j, seules doivent apparaître les représentations du premier ensemble.

Par un léger abus de langage, on dit qu'il suffit de considérer l'invariance du potentiel V_{cr} par les opérations du sous-groupe $\mathcal{G}_{p'}$. En réalité, cette formulation signifie que dans le développement (2-13) n'apparaissent que les représentations "positives" de $\mathcal{G}_p$.

Champ cristallin de symétrie cubique.

Supposons que V_{cr} soit invariant par les opérations du groupe du cube Oh (ou bien O). Le développement (2-10) s'écrit :

$$V_{cr} = A_4 \sum_n (x_n^4 + y_n^4 + z_n^4 - \frac{3}{5} r_n^4) + A_6 \sum_n \left(x_n^2 y_n^2 z_n^2 + (x_n^4 + y_n^4 + z_n^4 - \frac{3}{5} r_n^4) \frac{r_n^2}{22} - \frac{r_n^6}{105} \right) \tag{2-17}$$

les termes de degré impair ou de degré supérieur à 6 n'interviennent pas puisque $l = 3$. (Cf. appendice II).

Pour des raisons de simplicité nous nous sommes bornés au terme du quatrième degré et avons écrit :

$$V_{cr} \simeq V_4 = \beta A \left[J_x^4 + J_y^4 + J_z^4 - \frac{3}{5} J^2 (J+1)^2 + \frac{1}{5} J(J+1) \right] \tag{2-18}$$

---

(1) Voir appendice III.

β est un coefficient qui correspond à $\langle J \| J_k \| J \rangle$. On le détermine en calculant, par exemple, $\langle JJ \| V_4 \| JJ \rangle$ par la méthode donnée au chapitre I, pour les éléments de matrice réduits (Cf. appendice II). Les valeurs numériques de ces coefficients ont été déterminées par Kynch [9] et Stevens [8]; elles sont reproduites dans le tableau II-7. Le dernier terme du membre de droite de (2-18) rend compte de la non-commutation des composantes de J dans l'expression, équivalent à r^4.

La forme du potentiel choisie conduit aux éléments de matrice :

$$\begin{aligned} &\langle JM | V_4 | JM \rangle = \beta A \left\{ \frac{7}{4} M^4 + \frac{M^2}{4} [5 - 6J(J+1)] + \frac{3}{20} (J-1) J (J+1)(J+2) \right\} \\ &\langle JM \pm 4 | V_4 | JM \rangle = \frac{\beta A}{8} \left[\frac{(J \mp M)!\ (J \pm M + 4)!}{(J \mp M - 4)!\ (J \pm M)!} \right]^{1/2} \\ &\langle JM' | V_4 | JM \rangle = 0 \qquad \text{si} \qquad M' \neq M \qquad \text{ou} \qquad M' \neq M \pm 4 . \end{aligned} \tag{2-19}$$

De la résolution de l'équation séculaire (2-11) on tirera les niveaux d'énergie correspondant à la décomposition de la représentation D^J en les représentations irréductibles Γ_1, Γ_2, Γ_3, Γ_4, Γ_5 du groupe simple O, si J est entier et en les représentations Γ_6, Γ_7, Γ_8 du groupe O^+ si J est demi-entier. Dans le tableau II-4 nous avons reporté cette décomposition pour les terres rares envisagées. Dans l'appendice III nous donnons les méthodes d'obtention directes de combinaisons linéaires d'états $|JM\rangle$ pouvant servir de base aux représentations irréductibles des groupes O et O^+. La diagonalisation des équations du type (2-16) nous mène, pour les terres rares étudiées, à des équations du troisième degré au plus. Dans le tableau II-4 nous avons reporté les valeurs de l'énergie des divers niveaux, ainsi que les fonctions propres qui leur correspondent.

Ces tableaux donnent des valeurs de l'énergie proportionnelle a A. Pour connaître la succession des niveaux il faut faire une hypothèse sur le signe de A. Si on suppose pour chaque ion de terre rare un environnement de six charges négatives réparties sur un octaèdre, A est positif (1). L'ordre des niveaux que l'on en déduit est reproduit sur la figure II-3 où l'on a supposé que A était le même pour toutes les terres rares.

Comme le multiplet J est scindé en un certain nombre de sous-niveaux $\Gamma^j(n)$ le neutron pourra induire des transitions entre états d'un même sous-niveau (élastiques $p_f = p_o$) ou entre états de deux sous-niveaux distincts (inélatiques). Ces transitions sont régies par l'équation de conservation de l'énergie :

$$\frac{\hbar^2}{2m} (p_f^2 - p_o^2) = E_i - E_f \tag{2-20}$$

Nous avons pu mettre les états propres des sous-niveaux sous la forme générale :

$$\Psi_i = \sum_M A_M^i |JM\rangle$$

et par conséquent nous pouvons utiliser la formule (2-2) de section efficace. On posera :

$$\mathcal{C}_\nu^i(f, 0) = \mathcal{C}_\nu(0, f) = \sum_{q=-(2\nu+1)}^{2\nu+1} \left| \sum_{M'} \sum_{M} A_{M'}^{f*} A_M^o (-)^{J-M} \langle JM'J - M | 2\nu + 1 \quad q \rangle \right|^2 \tag{2-21}$$

expression qui, reportée dans l'équation (2-2), nous fournira la section efficace pour une transition entre les états 0 et f (2). Celle-ci s'écrira :

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{o \to f} = \left(\frac{M_N e g_N}{2mc}\right)^2 B \sum_{i=o}^{b} \sum_{h=o}^{c} \sum_{\nu=o}^{l} \frac{|\alpha_\nu - \beta_{\nu+1}|^2}{4\nu + 3} \mathcal{C}_\nu(h, i)_{o \to f} \tag{2-22}$$

où

$$B = \frac{p_f}{p_o} \frac{e^{-E_o/k_B T}}{\sum_j \exp[-E_j/k_B T]}$$

---

(1) Pour les sulfates de terres rares, Kynch [9] a calculé une valeur de A égale à 3300 cm^{-1}, valeur que l'on ne peut directement utiliser pour les oxydes, mais qui donne un ordre de grandeur des effets.

(2) Si l'on suppose que la constante A du potentiel est nulle, on doit retrouver la section efficace de l'ion sans interaction. Il faut :

$$\sum_f \mathcal{C}_\nu(f, o) = \frac{4\nu + 3}{2J + 1}$$

Ce critère est utilisé avec profit pour vérifier les calculs intermédiaires.

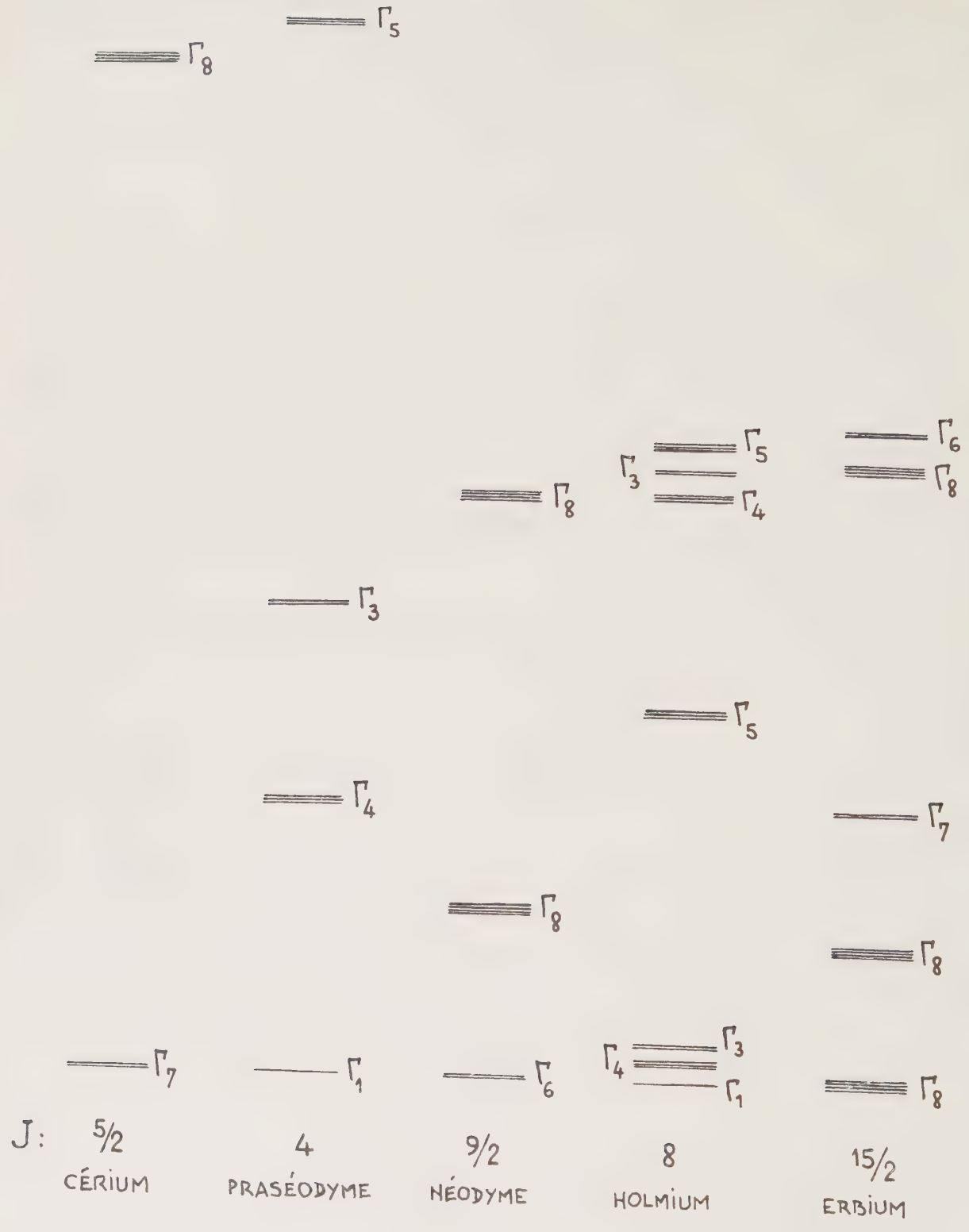


Figure II-3 - Succession des niveaux dans un champ cubique.

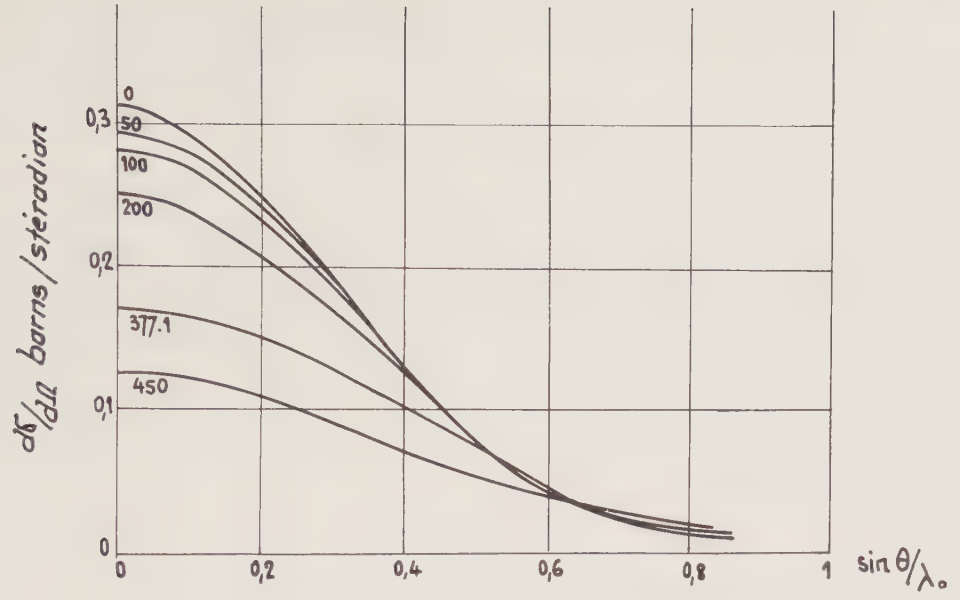


Figure II-5-a - Section efficace totale en fonction de la distance $\Gamma_7 \Gamma_8$ en cm^{-1} (377,1 cm^{-1} correspondant à A = 3300 cm^{-1}) au zéro absolu dans le cas du cérium.

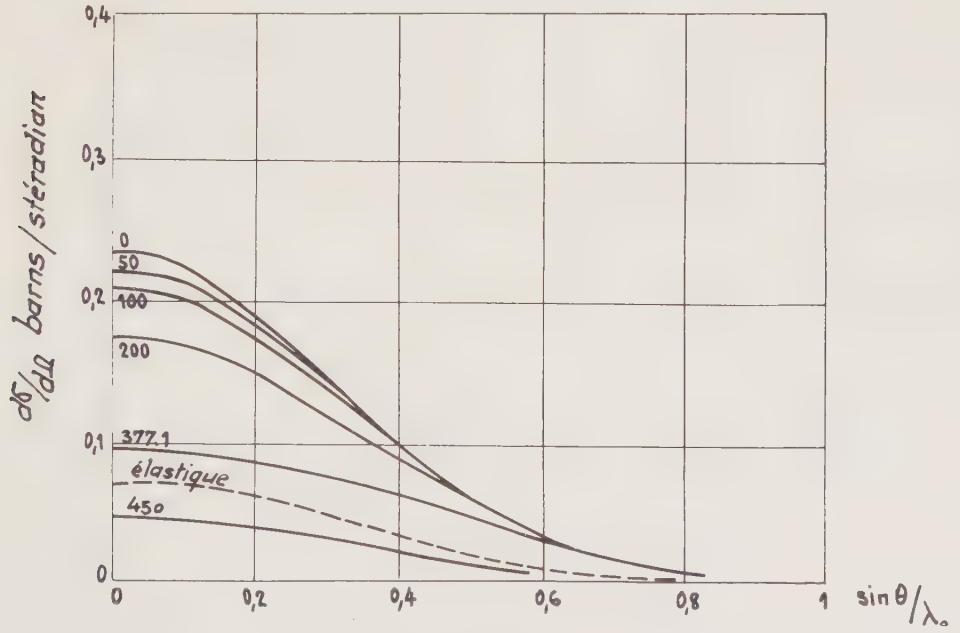


Figure II-5-b - Variation des sections efficaces élastique et inélastique ($\Gamma_7 \longrightarrow \Gamma_8$) au zéro absolu dans le cas du cérium pour diverses valeurs de A. (λ_o = 1,141 Å).

b est la dégénérescence de l'état initial (dont les fonctions propres sont repérées par l'indice i) , c est la dégénérescence de l'état final (dont les fonctions propres sont repérées par l'indice h) .

La section efficace totale sera la somme de toutes les expressions du type (2-22) étendues à tous les états des ions.

Dans le tableau II-5 nous avons donné les valeurs des coefficients $\mathcal{C}_\nu$ calculés par Mlle Boré à l'aide de l'ordinateur IBM 650.

Les résultats de l'étude ci-dessus sont résumés par les figures II-5 et II-6

Les figures II-5 donnent, en fonction du paramètre sin ϑ/λ_o, la variation des sections efficaces "élastique", "inélastique" et "totale" au zéro absolu dans le cas du cérium et du praséodyme (dans ce dernier cas la section efficace est purement inélastique) pour diverses valeurs du paramètre A.

Les figures II-6 représentent les variations des diverses sections efficaces (élastiques , inélastiques et totale) en fonction de la température. Pour fixer les idées, nous avons choisi A = 3300 cm^{-1} et nous avons, pour une même terre rare, groupé les niveaux dont les distances sont trop faibles pour créer une variation appréciable de la longueur d'onde, ou bien dont les distances sont sensiblement égales. Les légendes des figures donnent explicitement la manière dont sont effectués ces groupements.

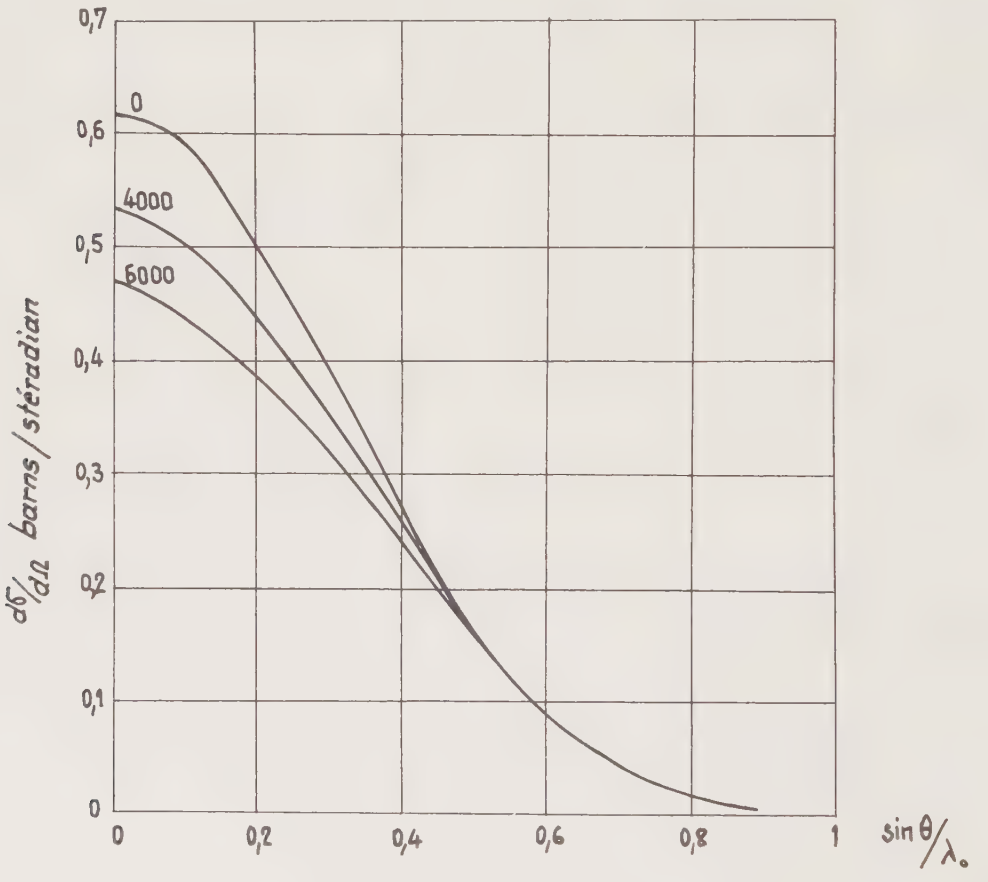


Figure II-5-c - Variation de la section efficace au zéro absolu dans le cas du praséodyme pour diverses valeurs de A. (La seule section efficace non nulle est celle de la transition $\Gamma_7 \longrightarrow \Gamma_4$. λ_o = 1,141 Å.

Remarque et discussion.

a) A quelle condition peut-on observer une transition dont la section efficace est donnée par (2-22). L'équation de conservation de l'énergie nous montre que si l'on veut observer des transitions où le neutron perd de l'énergie il faut :

$$\frac{\hbar^2}{2 M_N} p_o^2 > E_f - E_i .$$

Si, pour fixer les idées, nous choisissons le cas du cérium où seuls deux niveaux existent, à une distance Δ l'un de l'autre, et si nous fixons $A = 3300\ cm^{-1}$, des neutrons incidents de longueur d'onde 1,141 Å auront pour longueur d'onde finale 2,22 Å. Cette variation est détectable avec un spectromètre à triple cristal. Pour avoir des sections efficaces assez importantes on se placera aux petits angles, et à la température ambiante pour ne pas compliquer inutilement l'appareillage. Dans le cas du cérium déjà cité on détectera trois vecteurs d'onde différents :

$$p_o,\ p_1,\ p_2$$

avec :

$$\frac{\hbar^2}{2 M_N} (p_o^2 - p_2^2) = \Delta , \qquad \frac{\hbar^2}{2 M_N} (p_1^2 - p_o^2) = \Delta .$$

Si Δ n'est pas trop grand, les sections efficaces seront approximativement dans le rapport (1) :

$$\frac{p_2}{p_1} e^{-\Delta / k_B T} .$$

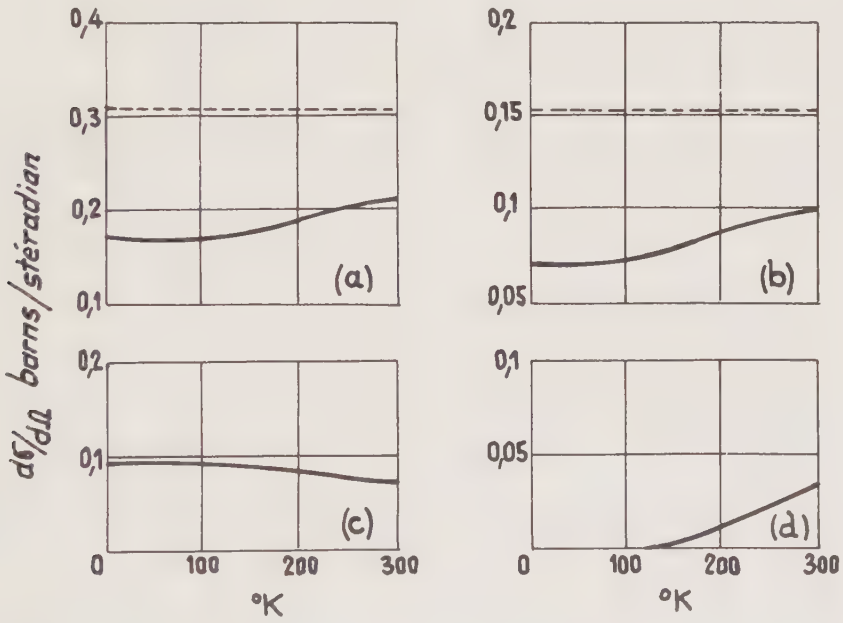


Figure II-6 (1) - Variation des différentes sections efficaces (Totale (a), élastique (b), inélastique $\Gamma_7 \rightarrow \Gamma_8$ (c) inélastique $\Gamma_8 \rightarrow \Gamma_7$ (d) du cérium avec la température pour $A = 3300\ cm^{-1}$, sin $\theta = 0$, $\lambda_o = 1,141$ Å.

(1) On peut alors négliger les variations du facteur de forme.

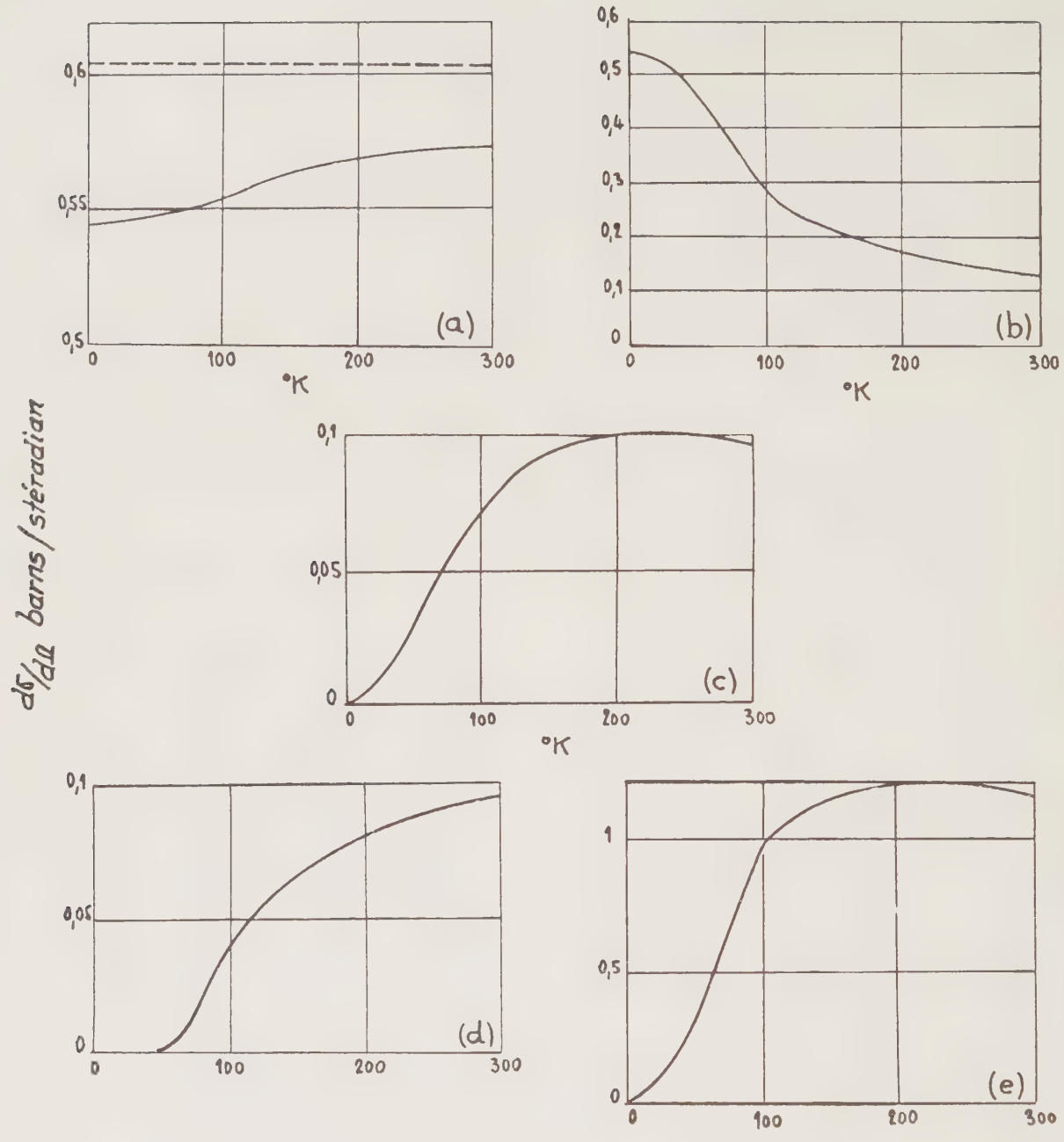


Figure II-6 (2) - Variation des différentes sections efficaces du praséodyme avec la température (Totale (a), inélastique $\Gamma_1 \rightarrow \Gamma_4$ (b), $\Gamma_4 \rightarrow \Gamma_1$ (c), $\Gamma_3 \rightarrow \Gamma_4$ (d), $\Gamma_4 \rightarrow \Gamma_3$ (e)). A = 3300 cm , θ = 0. λ_o = 1,141 Å. Les autres transitions ont une section efficace inférieure à 10^{-2} barns/stéradian.

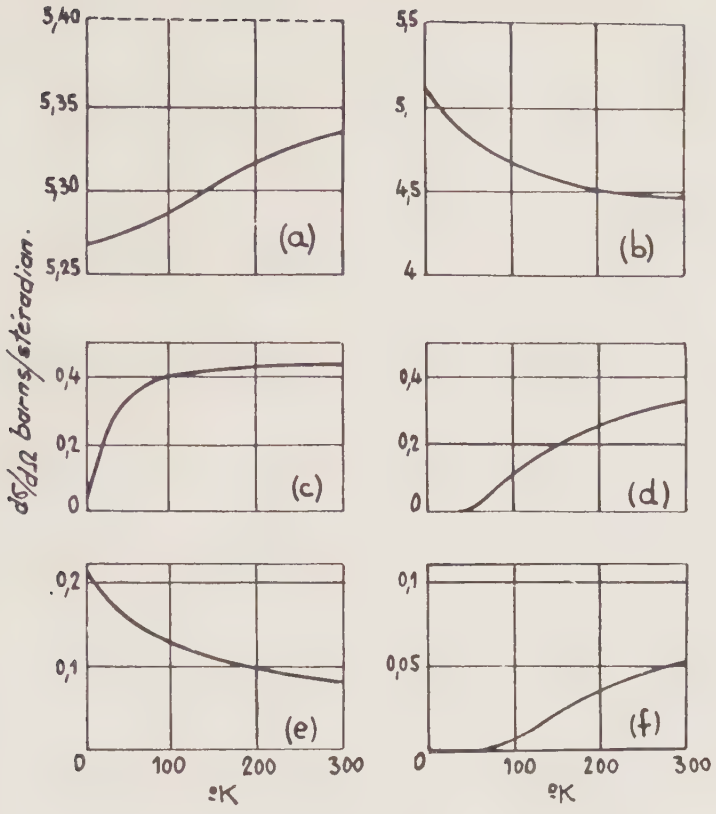


Figure II-6 (3)-Variation des diverses sections efficaces de l'holmium avec la température pour A = 3300 cm^{-1}, $\sin\theta = 0$, $\lambda = 1,141$ Å.
Un certain nombre de niveaux étant voisins ou pratiquement équidistants, on les a groupés pour obtenir les courbes reproduites.

Courbe (a) : Section efficace totale.

Courbe (b) : Section efficace quasi élastique. Elle comprend les transitions dans les ensembles : $\Gamma_1\Gamma_4^{(1)}\Gamma_3^{(1)}$, $\Gamma_5^{(1)}$, $\Gamma_4^{(2)}\Gamma_3^{(2)}\Gamma_5^{(2)}$.

Courbe (c) : Section efficace inélastique. Elle comprend les transitions de l'ensemble $\Gamma_1\Gamma_4^{(1)}\Gamma_3^{(1)}$ à $\Gamma_5^{(1)}$ et de $\Gamma_5^{(1)}$ à l'ensemble $\Gamma_4^{(2)}\Gamma_3^{(2)}\Gamma_5^{(2)}$.

Courbe (d) : Section efficace inélastique : Transitions inverses des précédentes.

Courbe (e) : Section efficace inélastique : Elle comprend les transitions de l'ensemble $\Gamma_1^1\Gamma_4^{(1)}\Gamma_3^{(1)}$ à l'ensemble $\Gamma_4^{(2)}\Gamma_3^{(2)}\Gamma_5^{(2)}$.

Courbe (f). Section efficace inélastique. Transitions inverses des précédentes.

Nous reproduisons ci-après la distance des niveaux dans l'holmium pour A = 3300 cm^{-1}.

$\Gamma_1\Gamma_4^{(1)} = 8,11\ cm^{-1}$

$\Gamma_1\Gamma_3^{(1)} = 12,86\ cm^{-1}$

$\Gamma_1\Gamma_5^{(1)} = 138,91\ cm^{-1}$

$\Gamma_1\Gamma_4^{(2)} = 218,74\ cm^{-1}$

$\Gamma_1\Gamma_3^{(2)} = 227,14\ cm^{-1}$

$\Gamma_1\Gamma_5^{(2)} = 239,55\ cm^{-1}$

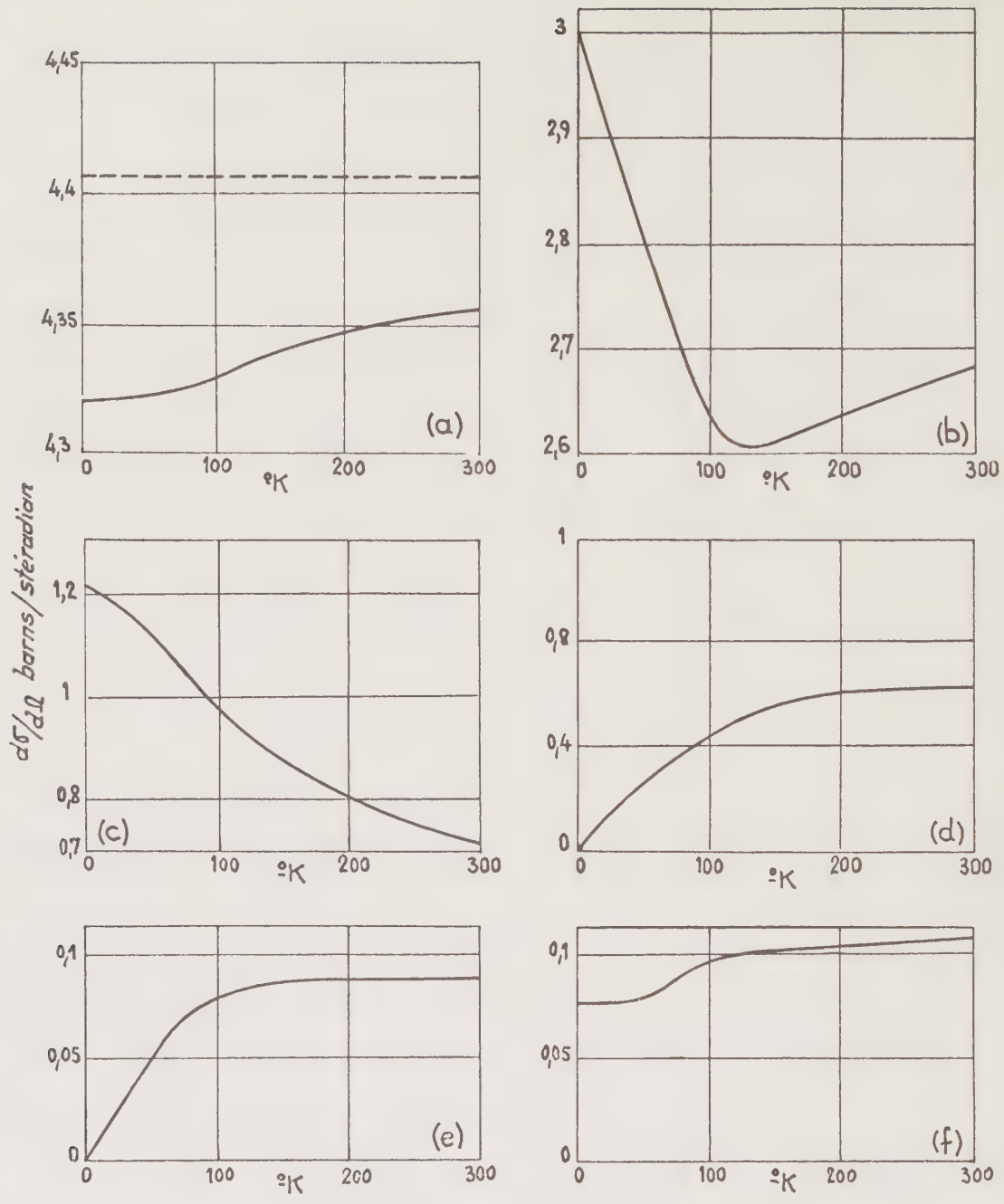


Figure II-6 (4) - Variation des diverses sections efficaces de l'erbium avec la température pour A = 3300 cm^{-1} $\theta = 0$. $\lambda_o = 1,141$ Å. On a opéré des groupements semblables à ceux faits pour l'holmium.

Courbe (a) : section efficace quasi élastique.
Elle comprend les transitions dans les ensembles $\Gamma_8^{(1)}\Gamma_8^{(2)}\Gamma_7$, $\Gamma_8^{(3)} + \Gamma_6$.

Courbes (c) : Somme des transitions $\Gamma_8^{(1)} \longrightarrow \Gamma_8^{(2)}$ et $\Gamma_8^{(3)} \longrightarrow \Gamma_7$; (d) transitions inverses des précédentes.

Courbes (e) : Transition $\Gamma_8^{(2)} \longrightarrow \Gamma_8^{(3)} + \Gamma_6$; (f) transition $\Gamma_8^{(1)} \longrightarrow \Gamma_7$ et $\Gamma_7 \longrightarrow \Gamma_8^{(3)} + \Gamma_6$.

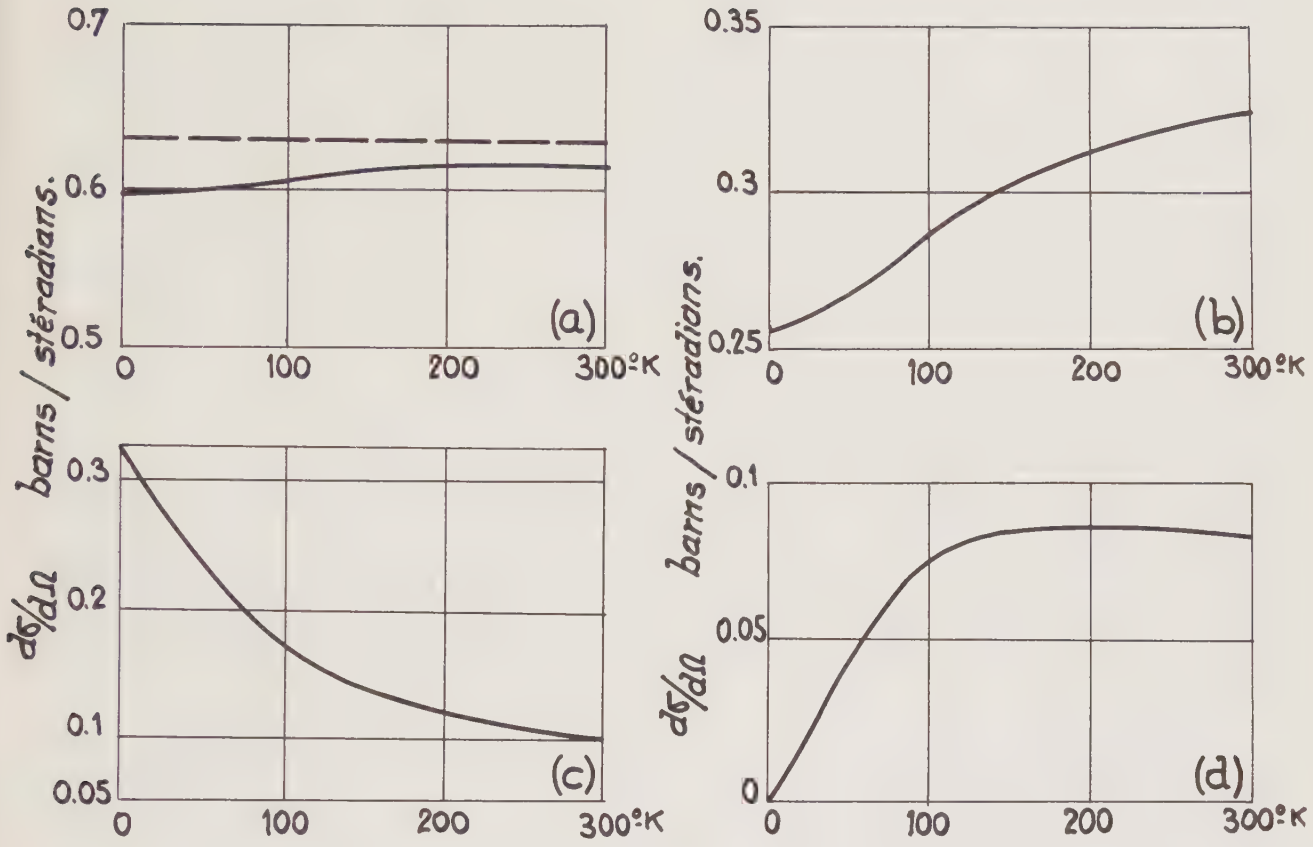


Figure II-6 (5) - Variation des diverses sections efficaces du néodyme avec la température, pour A = 3300 cm^{-1}; sin $\theta = 0$; $\lambda = 1,141$ Å.
(Totale (a), élastique (b), inélastique $\Gamma_6 \longrightarrow \Gamma_8^{(1)}$(c), $\Gamma_8^{(1)} \longrightarrow \Gamma_6$ (d). Les autres transitions ont une section efficace inférieure à 0,04 barns).

On peut utiliser, pour détecter les effets prévus, une technique expérimentale différente qui met en œuvre un spectromètre à temps de vol [1]. Cette technique fournit directement le spectre des neutrons diffusés sans qu'il soit nécessaire de passer par l'intermédiaire d'un cristal analyseur.

Cependant, pour des raisons liées au pouvoir séparateur, ces appareils ne peuvent utiliser que des neutrons de grande longueur d'onde. Une longueur d'onde usuelle est 4,55 Å. Ceci interdit l'observation des transitions hypoélastiques d'énergie supérieure à 36 cm^{-1}. Les transitions hyperélastiques par contre peuvent être étudiées sans difficulté.

Cette technique a été utilisée par D. Cribier et B. Jacrot dans le cas des sesquioxydes.Nous étudierons leur détermination au paragraphe suivant.

b) L'examen des figures II-5 et II-6 conduit à une conclusion intéressante si on la rapproche du résultat de la détermination de Koehler et Wollan. En effet, le dispositif expérimental de ces auteurs ne permettait pas d'analyser en énergie les neutrons diffusés. Leur mesure fournissait, par construction, la valeur de la section efficace totale.

Pour les terres rares étudiées ici, et à l'exception du cérium, nous constatons que cette section efficace ne varie que très peu avec la température. Ceci provient de ce que les probabilités de transition entre niveaux très éloignés sont très faibles. Il est clair que cette insensibilité de la section efficace totale demeure, même pour une augmentation importante du coefficient de champ cristallin. De fait un calcul quantitatif montre que, même pour une valeur doublée de A, la section efficace totale ne varie que de quelques pour cent (sauf, bien entendu, pour le cérium et le praséodyme).

Nous pouvons donc, a priori, attribuer à un état de fait de cette sorte la constatation de Koehler et Wollan d'une faible influence du champ cristallin que nous avions signalée ci-dessus.

Cependant pour être tout à fait certains de cette explication, nous devons envisager une situation plus réaliste que celle d'un champ cristallin cubique pour décrire le cas des oxydes. C'est ce qui sera fait dans le paragraphe suivant, dans lequel nous envisageons également un essai de détermination expérimentale directe des niveaux dus au champ cristallin.

Remarquons, pour terminer, que le cérium trivalent se présente comme un cas assez à part (à l'exception peut-être du praséodyme) où l'influence du champ cristallin peut dépasser 50 %. L'étude de cet ion pourrait présenter un intérêt particulier surtout si l'on tient compte de la relative simplicité de la décomposition du niveau fondamental, qui, par suite du théorème de Kramers, ne peut donner naissance, au plus, qu'à trois doublets quelle que soit la symétrie.

Etude des sesquioxydes de terre rare.

Nous allons entreprendre le calcul des sections efficaces des transitions élastiques et inélastiques entre les divers niveaux résultant de la décomposition du niveau fondamental J de l'ion libre sous l'action d'un champ cristallin électrostatique effectif dont la symétrie est celle des sesquioxydes de terres rares M_2O_3. Nous avons en fait étudié deux cas : celui des sesquioxydes d'holmium et d'erbium afin de pouvoir comparer les résultats du calcul à des déterminations expérimentales.

Les sesquioxydes de terres rares cristallisent dans le système de la bixbyite. Le groupe d'espace est T_h^7. Deux sites sont possibles pour les atomes magnétiques.

Dans le premier site (ci-après désigné sous le nom d'environnement 1 et qui contient 8 atomes dans la maille cubique), l'ion magnétique est placé au centre d'un cube, les six ions oxygène sont placés au sommet de ce cube à l'exception des extrémités d'une des diagonales du cube (axe ternaire de la maille). Le groupe ponctuel est D_3^d.

Dans le deuxième site (ci-après désigné sous le nom d'environnement 2 et qui contient 24 atomes dans la maille cubique), l'ion magnétique est placé au centre d'un cube déformé. Les six ions oxygène sont placés aux sommets de ce cube à l'exception des deux extrémités de la diagonale d'une des faces. Nous avons admis, par raison de simplification, que le cube déformé est un véritable cube [2]. Le groupe ponctuel est alors C_2^v.

Cette simplification étant admise, nous choisirons une distance identique pour tous les sites entre les atomes de terre rare et les ions oxygène. Cette distance est de 2,28 Å pour les deux sesquioxydes considérés.

---

(1) Pour la description d'un appareillage de ce type voir B. Jacrot et G. Gobert, J. Phys. Radium, 1959, 20, 518, A.

(2) La position des atomes d'oxygène dans les sesquioxydes a été déterminée par A. Fert, Diplôme d'Etudes Supérieures, 1960 (Saclay).

Pour le premier environnement, nous avons choisi comme axes de coordonnées un axe des z porté par l'axe ternaire où manquent les deux atomes d'oxygène ; l'axe des x est perpendiculaire au plan diagonal contenant oz. L'origine des coordonnées est au centre de l'ion magnétique.

Pour le second environnement, les axes de coordonnées sont fixés comme suit : l'origine des coordonnées est au centre de l'ion de terre rare ; l'axe des z est pris perpendiculaire à la face qui ne contient que deux atomes d'oxygène, l'axe des x est pris parallèle à la diagonale de cette face qui ne porte pas d'atomes. Ces deux environnements sont reproduits sur la figure II-7.

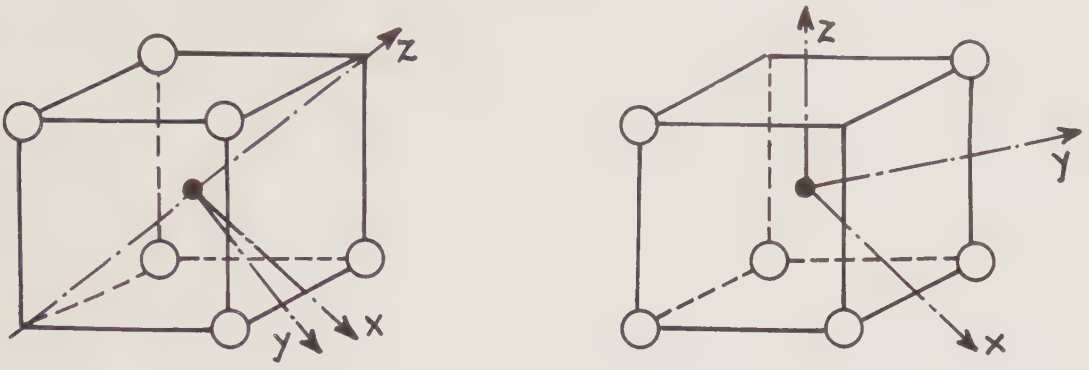


Figure II-7 - Environnement des atomes de terre rare dans les sesquioxydes.

On remarquera que les axes de coordonnées, et par conséquent ceux de quantification, sont différents pour les deux environnements. Ceci ne porte pas à conséquence dans le cas particulier où nous étudions des poudres avec des neutrons non polarisés. Il faudrait être plus circonspect si on utilisait des monocristaux.

Dans l'appendice II nous avons montré que l'on peut développer le potentiel cristallin en série des puissances successives de $\frac{r_n}{r_B} x_n$, $\frac{r_n}{r_B} y_n$, $\frac{r_n}{r_B} z_n$, et que ces termes se groupent, par degrés successifs, en polynômes dont les expressions, que l'on trouvera rassemblées dans le livre de D. Saint-James [14], ont été données par H. Bethe et C. von der Lage [15] et par D. Bell [16].

Dans l'appendice II, nous exposons également la méthode de Stevens qui permet d'écrire directement les éléments de matrice de tels polynômes dans une multiplicité donnée. On trouvera explicitement ces éléments de matrice dans le rapport de F. Boutron et D. Saint-James [10].

Après de longs calculs que nous avons menés avec la collaboration de F. Boutron, les développements correspondant aux deux environnements peuvent être écrits :

$$V_1 = \frac{2A}{r_B}\left\{6 - A_2 V_2^0 + \frac{A_4}{108} V_4^0 + \frac{47 A_6}{648} V_6^0 - \frac{154}{81} A_6 V_6^6\right\}$$

$$V_2 = \frac{2A}{r_B}\left\{6 + A_2 V_2^0 - \frac{35}{36} A_4 (V_4^1 + 7 V_4^2 + 4 V_4^3) + \frac{A_6}{72}(-36 V_6^1 - 385 V_6^2 + 84 V_6^3 - 7 V_6^4)\right\} \quad (2\text{-}23)$$

Le facteur 2 provient de ce que l'ion oxygène porte une charge double. A est une constante qui dépend du système d'unités choisi (par exemple si l'on veut l'énergie en cm^{-1}, A = 116640, en Å).

$A_p \simeq \langle r^p \rangle$ est le résultat de l'intégration radiale. Si l'on prend comme fonctions électroniques radiales les fonctions hydrogénoïdes de la couche 4f on aura :

$$A_p = \frac{(p+6)!\, a^p}{r_B^p}$$

où a est le rayon de la couche 4f (0,468 Å pour Ho^{+++}, 0,460 Å pour Er^{+++}) ; les quantités V_p^q sont les divers polynômes en x_n, y_n, z_n de degré p qui apparaissent dans le développement. Bien entendu, seuls les termes de degré pair et inférieur à sept doivent être retenus (Cf. appendice II). Ces polynômes sont reproduits dans le tableau II-6.

Le calcul des éléments de matrice est mené par la méthode de Stevens. Nous les extrayons du rapport de F. Boutron et D. Saint-James déjà cité et nous les reproduisons dans le tableau II-7. Les coefficients α_J, β_J, γ_J qui apparaissent dans ces tableaux sont les équivalents des éléments de matrice réduits (Cf. appendice II). Ils ne dépendent que de J et valent respectivement :

J	α_J	β_J	γ_J
15/2	$4/45 \times 35$	$2/11 \times 15 \times 273$	$8/13^2 \times 11^2 \times 3^2 \times 7$
8	$-1/30 \times 15$	$-1/11 \times 2730$	$-5/13 \times 33 \times 9009$

Les différents niveaux sont alors donnés par la résolution de l'équation séculaire :

$$\det |< JM' |V| JM > - \lambda < JM' | JM > | = 0 . \qquad (2\text{-}11)$$

Nous pourrions, ici encore, employer des méthodes de théorie des groupes pour simplifier cette expression. Nous avons cependant préféré utiliser le programme de diagonalisation de matrices symétriques écrit pour le calculateur électronique de Saclay. Les valeurs des énergies et les vecteurs propres obtenus sont reproduits dans les tableaux II-8.

Remarques : Dans le cas du groupe D_3^d (environnement 1) les dégénérescences les plus fortes sont bien d'ordre 2. Dans le cas du groupe C_2^v (environnement 2) toutes les dégénérescences (à l'exception des dégénérescences de Kramers) sont levées.

Nous avons néanmoins groupé les niveaux dont les distances étaient inférieures à quelques cm^{-1}.

Le calcul des sections efficaces se poursuit comme dans le cas du champ cubique. Les coefficients $\mathcal{C}_\nu$, définis par l'équation (2-21), ont été calculés à l'aide du programme écrit par Mlle Boré. Nous en avons reproduit les valeurs sur le tableau II-9. (Les niveaux y sont disposés par ordre d'énergie croissante). Nous avons pu alors écrire un programme de calcul de sections efficaces. Ces calculs ont été menés à un angle de diffusion nul. Il est cependant nécessaire d'utiliser la formule (2-22) et non la formule simplifiée de Schwinger parce que le vecteur de diffusion des transitions inélastiques n'est pas nul et cet effet est très important pour les neutrons incidents de forte longueur d'onde.

Deux calculs ont été menés pour des neutrons de longueur d'onde incidente égale à 4,35 Å et de longueur d'onde égale à 1,141 Å.

Pour les neutrons de 4,35 Å les calculs correspondent à une diffusion à la température ambiante. Les résultats font l'objet du tableau II-10.

On constatera que la section efficace totale est nettement inférieure à la section efficace de l'ion libre. Elle est donnée dans le tableau suivant :

	Environnement 1	Environnement 2	Ion Libre
Ho^{+++}	4,21 b/st	4,72 b/st	5,4 b/st
Er^{+++}	3,94 b/st	3,87 b/st	4,4 b/st

Cette diminution tient justement au fait que le vecteur de diffusion n'est pas nul ce qui conduit à un facteur de forme différent de l'unité pour les transitions inélastiques. Avant d'envisager les résultats obtenus pour une longueur d'onde incidente de 1,141 Å nous allons comparer les calculs précédents avec une détermination expérimentale due à Cribier et Jacrot, afin de décider de la validité du modèle.

Détermination de D. Cribier et B. Jacrot.

D. Cribier et B. Jacrot [13] ont tenté une détermination expérimentale des effets annoncés à l'aide du spectromètre à temps de vol de Saclay. La longueur d'onde utilisée était de 4,35 Å, l'angle de diffusion nul.

Trois corps ont été étudiés. Ce sont les sesquioxydes de néodyme, d'holmium et d'erbium. L'expérience a été conduite à la température ambiante.

L'étude du sesquioxyde de néodyme n'a pas donné de résultats exploitables, par suite de la présence d'une forte section efficace de diffusion nucléaire incohérente (1).

Dans le cas des sesquioxydes d'holmium et d'erbium, les constatations suivantes ont été faites :

Dans le spectre des neutrons diffusés apparaît une raie "quasi-élastique" élargie par rapport au spectre incident et qui résulte de la superposition de la diffusion nucléaire incohérente de la diffusion magnétique élastique, de la diffusion magnétique inélastique liée à des transitions entre niveaux magnétiques rapprochés (quelques cm^{-1}).

En plus de cette raie quasi-élastique apparaissent un certain nombre de pics inélastiques liés à la diffusion magnétique avec gain d'énergie des neutrons.

Deux pics nettement séparés sont observés avec l'oxyde d'holmium ; ils correspondent à des transitions d'énergie 365 et 76 cm^{-1}. Trois pics apparaissent dans le cas de l'oxyde d'erbium, les énergies correspondantes étant : 420, 81, 40,5 cm^{-1}.

D'autres transitions existent certainement qui ne peuvent être observées soit que la section efficace soit trop faible, soit que les niveaux initial et final trop rapprochés se recouvrent soit, enfin, que le pouvoir séparateur de l'appareil soit insuffisant.

La figure II-8 reproduit les deux courbes expérimentales de Cribier et Jacrot. Il faut cependant s'assurer que les pics observés sont bien reliés à une diffusion d'origine magnétique. On en acquiert la certitude si on remarque que :

- les sesquioxydes étudiés ont une structure identique, des propriétés nucléaires voisines et que, par conséquent, ils doivent posséder une diffusion incohérente due aux phonons analogue.

- les sections efficaces de diffusion magnétiques sont d'un ordre de grandeur très supérieur à celles des diffusions par les phonons.

Pour confirmer ce point de vue, Cribier et Jacrot ont déterminé la diffusion des neutrons, dans les mêmes conditions, par l'oxyde de thallium, substance non-magnétique de même structure. Le spectre de diffusion incohérente par les phonons que l'on obtient ne présente aucun caractère saillant et reste assez faible.

Enfin Cribier et Jacrot ont effectué une nouvelle détermination à une température plus élevée (370°C). Les effets de la température sont multiples :

i) la population des niveaux élevés augmente. La raie de 265 cm^{-1} de l'oxyde d'holmium et celle de 420 cm^{-1} de l'oxyde d'erbium croissent en intensité comme le prévoit le facteur de Boltzmann. La raie quasi-élastique est élargie, et Cribier et Jacrot pensent, qu'en partie tout au moins, cet accroissement peut être attribué à des transitions de faible énergie entre niveaux élevés qui se peuplent.

ii) la dilatation du réseau se fait sentir. Elle diminue l'intensité du champ cristallin ; il en résulte une diminution de l'ordre de 3 % de l'énergie des transitions ; cet effet est surtout visible sur la raie de 365 cm^{-1} de l'holmium.

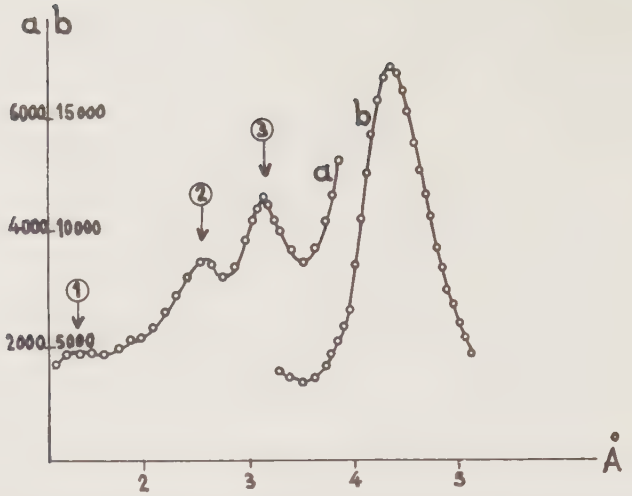
iii) les niveaux doivent être élargis, mais aucune mesure de largeur de niveau ne peut être effectuée pour le moment. (Cf. Chapitre IV).

Les résultats précédents ne sont pas d'une précision telle que l'on puisse en tirer une identification des niveaux. Deux constatations peuvent cependant être faites.

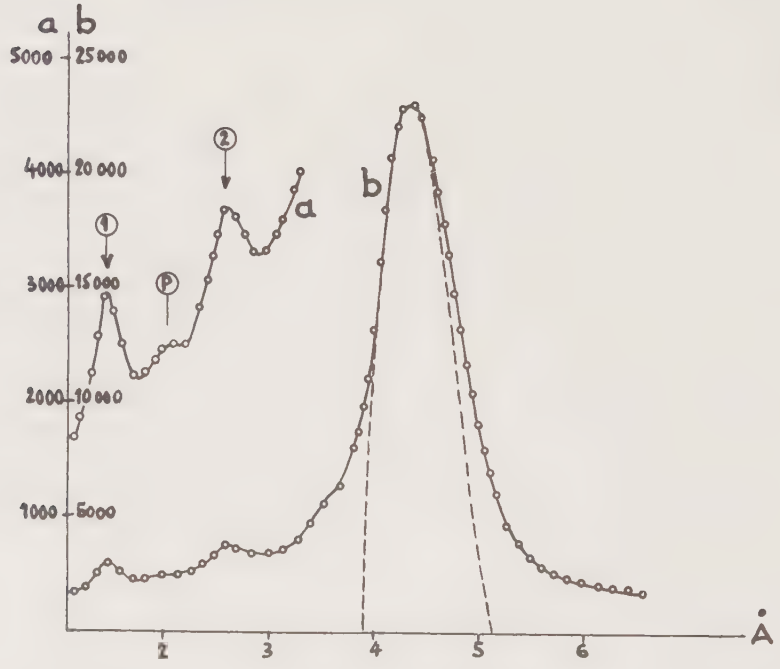
Tout d'abord l'élargissement du spectre élastique et sa déformation semblent liés à la présence d'un certain nombre de niveaux voisins. Ensuite la présence de transitions correspondant à une forte énergie est un peu surprenante et semble d'un ordre de grandeur trop élevé.

---

(1) Sa valeur est mal connue ; elle serait au moins de l'ordre d'une dizaine de barns. C'est cette raison qui nous a conduit à n'étudier théoriquement que les deux autres oxydes.



Spectre diffusé par Er_2O_3. On utilise deux échelles différentes pour les régions élastiques et inélastiques du spectre.



Spectre des neutrons diffusés par Ho_2O_3. La courbe en trait discontinu représente le spectre incident. La courbe (a) est la représentation à plus grande échelle d'une partie du spectre total (b).

Figure II-8 - Courbes expérimentales de Cribier et Jacrot.

Nous sommes à même d'effectuer la comparaison entre les résultats expérimentaux ci-dessus et les valeurs calculées pour les sections efficaces (1).

Dans ce but nous avons reporté sur les figures II-9 a et b les diverses valeurs des sections efficaces calculées. Comme les deux environnements ne sont pas en nombre égal nous avons multiplié les sections efficaces correspondant à l'environnement 1 par le facteur 1/4 et celles correspondant à l'environnement 2 par le facteur 3/4.

La comparaison avec les courbes expérimentales de Cribier et Jacrot est difficile. Celles-ci ne donnent pas, en effet, des résultats directement exploitables en fonction des sections efficaces. Nous avons cependant reporté sur les figures II-9 les résultats de nos calculs et la position des pics de Cribier et Jacrot. La hauteur des traits est approximativement proportionnelle à la section efficace mesurée. Nous pouvons constater :

1) Que dans le cas de l'holmium le pic de basse énergie se trouve placé aux environs de l'endroit calculé ; que le deuxième pic se trouve également dans une région où la théorie prévoit un certain nombre de raies ; enfin que la bosse marquée (P) sur le diagramme de Cribier et Jacrot et que ces auteurs hésitaient à qualifier est vraisemblablement d'origine magnétique.

2) Que dans le cas de l'erbium les calculs sont en moins bon accord avec l'expérience en ce qui concerne le pic de basse énergie qui se trouve à la place prévue mais avec une section efficace beaucoup plus forte que celle calculée.

3) Que l'ordre de grandeur des sections efficaces est bien celui calculé, ou, du moins, que le rapport des sections effficaces élastiques et inélastiques est bien celui que l'on prévoit.

4) Que les pics de haute énergie ne peuvent être expliqués à partir du modèle ci-dessus. Deux possibilités s'offrent alors :

a) Les pics de haute énergie ne sont pas d'origine magnétique. Ils pourraient provenir d'une interaction avec les phonons par exemple. Cette explication radicale (elle supprime le problème) est cependant en contradiction avec les déterminations faites par Cribier et Jacrot sur l'oxyde de thallium.

b) Le modèle de champ cristallin est faux. Cela semble en contradiction avec l'observation des autres pics. Il faut cependant remarquer que les fonctions hydrogénoïdes forment une mauvaise approximation de la fonction d'onde radiale de la couche 4f. Les coefficients A_p^q qui dépendent de $\langle r^p \rangle$ peuvent être assez faux comme on peut s'en rendre compte par l'étude de mesures optiques récentes (Cf. Erath. J. Chem. Phys. 34, 6, 1985 (1961)). La succession des niveaux calculés dépend fortement des paramètres $\langle r^p \rangle$ et le modèle choisi peut-être considérablement erroné.

Il se pourrait, également, qu'il faille faire intervenir des mélanges de fonctions du multiplet J supérieur dans les fonctions de base des niveaux considérés. Les effets du champ cristallin sur le niveau J fondamental sont, en effet, importants. La distance extrême qui est de l'ordre de 1000 cm^{-1} n'est plus tout à fait négligeable devant celle de deux multiplets J successifs (5000 à 8000 cm^{-1}).

---

(1) On aurait pu reprendre l'étude faite au paragraphe précédent et considérer le coefficient A qui fixe l'intensité du champ cubique comme un paramètre phénoménologique ; mais une modification même importante de ce paramètre ne permet pas de retrouver les résultats expérimentaux. On pourrait également être tenté d'ajouter les termes du sixième ordre dans le développement du potentiel de symétrie cubique. Mais la séduisante simplicité introduite par cette symétrie disparaît alors et il est préférable de considérer le champ cristallin des oxydes eux-mêmes.

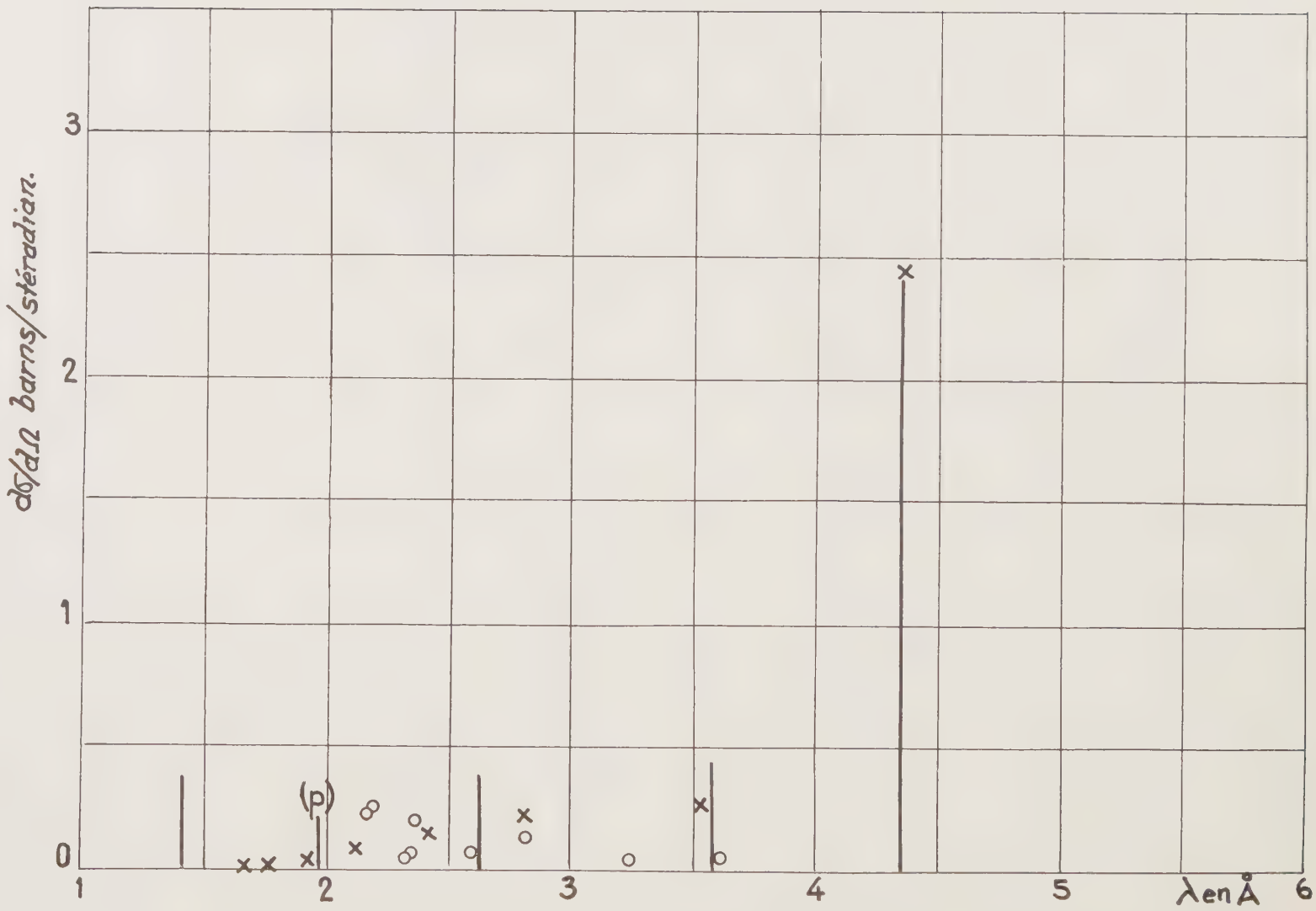


Figure II-9 (a) - Position des pics calculés et mesurés dans l'oxyde d'holmium.

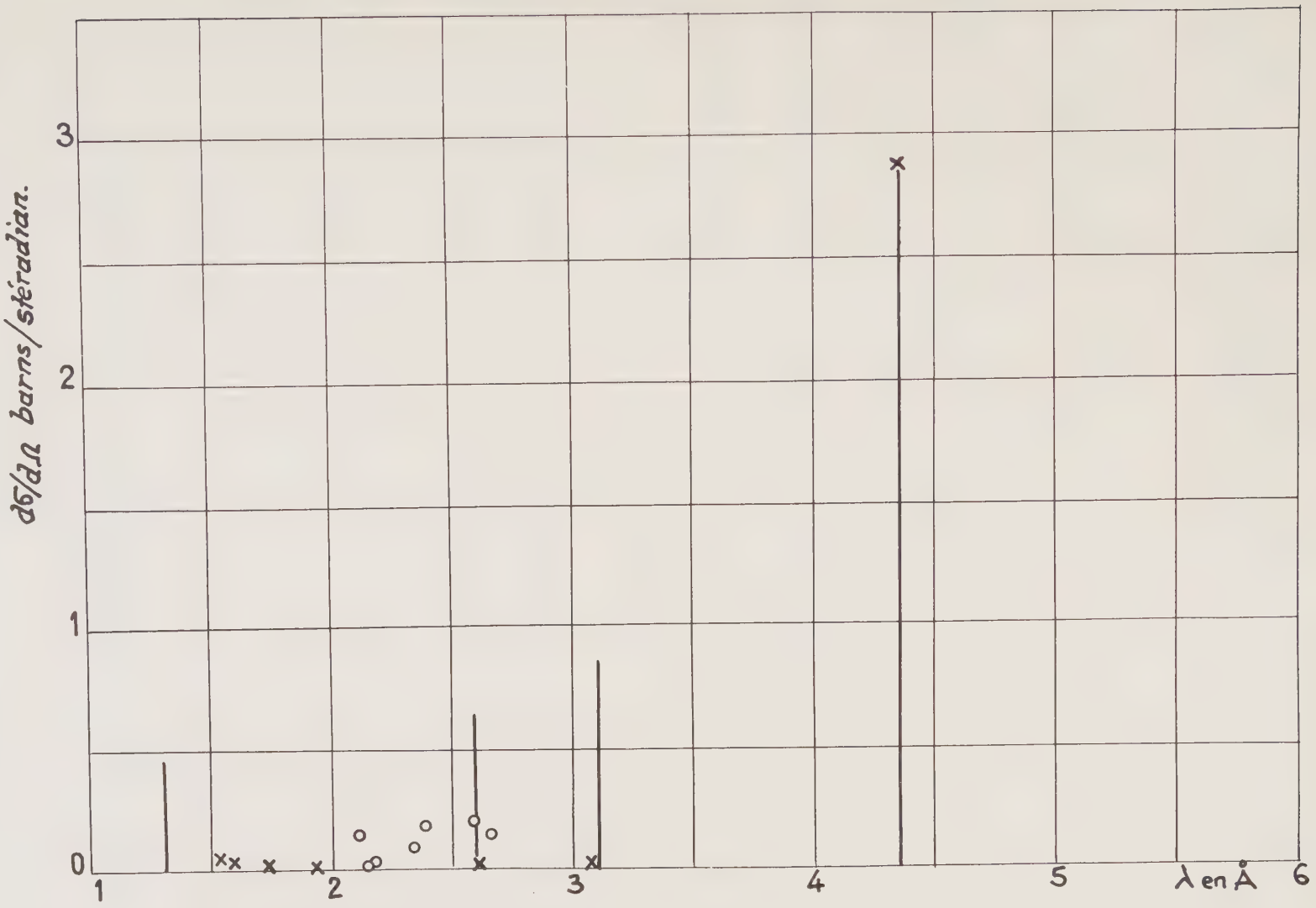


Figure II-9 (b) - Position des pics calculés et mesurés dans l'oxyde d'erbium.

Le calcul de cet effet ne présente pas de difficulté de principe ; cependant, outre sa longueur qui rend peu enclin à l'entreprendre - il faut en effet recalculer complètement les niveaux, puis utiliser la formule générale (1-68) car la forme simplifiée de Schwinger n'est pas valable puisque J n'est plus un bon nombre quantique - les résultats ne seraient pas très significatifs, tout au plus permettraient-ils d'évaluer l'ordre de grandeur du mélange des fonctions. Les déterminations expérimentales ne sont pas non plus d'une précision suffisante pour permettre une comparaison satisfaisante.

Retour sur la détermination de Koehler et Wollan.

L'accord qualitatif observé entre les calculs précédents et la détermination expérimentale de Cribier et Jacrot rend plus confiant pour aborder l'étude critique de la détermination de Koehler et Wollan.

Nous avons donc mené le calcul des diverses sections efficaces de transition pour des neutrons de 1,141 Å et pour des températures allant de l'ambiante au zéro absolu. La conclusion remarquable est que la section efficace totale est peu différente de la section efficace de l'ion libre (quelques pour cent) et est pratiquement indépendante de la température (Voir les figures II-10). Ce phénomène tient à deux causes complémentaires :

1) Les probabilités de transition pour les diffusions inélastiques à grand échange d'énergie ($|\Delta E|>$ énergie du neutron incident) sont très faibles.

2) L'énergie du neutron incident est grande devant l'énergie échangée dans la diffusion inélastique de section efficace non nulle. Le vecteur de diffusion reste petit, $p_f/p_o \# 1$. La règle de somme donnée pour les coefficients $\mathcal{C}_\nu$(note 2, p. 37)est applicable pour $\nu = 0$. La section efficace totale n'est pas modifiée au premier ordre.

Il faut néanmoins remarquer que cette conclusion n'est pas générale. Le cas du cérium, en effet, est tout à fait particulier, (Cf. fig.II-6-a) et la section efficace totale de cet ion doit notablement varier avec la température.

Conclusions et suggestions.

En résumé le modèle de champ cristallin nous a permis de montrer que, pour les ions de terres rares, à l'exception du cérium, les effets sur le multiplet J fondamental peuvent être importants sans que la section efficace totale, pour des neutrons d'énergie assez forte, soit modifiée. On pourra donc utiliser de tels neutrons pour déterminer le moment effectif puisque, pour un angle de diffusion nul, la section efficace est bien donnée par la formule de Schwinger.

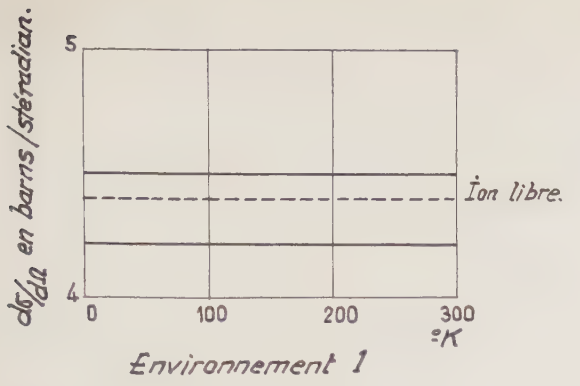
$$\frac{2}{3}\, g_J^2\, J(J+1)\,.$$

La détermination par Koehler et Wollan, du rayon de la couche 4f dans les terres rares est correcte pour la même raison.

Nous avons pu montrer également que la détection de la distance entre niveaux dus au champ cristallin est théoriquement possible et, par comparaison avec la détermination expérimentale de Cribier et Jacrot, que la position et l'ordre de grandeur de la section efficace des pics observés étaient en accord convenable avec le calcul, à l'exception toutefois des pics de diffusion de haute énergie que l'on peut espérer raisonnablement expliquer par la mauvaise adéquation des fonctions hydrogénoïdes.

Le travail effectué a permis de montrer également que les oxydes d'holmium et d'erbium sont particulièrement mal choisis pour la détermination des niveaux de champ cristallin. En effet, la grande complexité de la structure et, partant, la grande quantité de niveaux ne permettent pas une détection expérimentale sans ambiguité, une comparaison simple avec le calcul, d'autant plus que le pouvoir séparateur de l'appareillage est pour le moment insuffisant. Plusieurs suggestions peuvent alors être faites.

i) On peut améliorer l'appareillage et tenter de n'étudier que les transitions à faible énergie. Cette étude serait de loin la plus intéressante car peu de méthodes physiques permettent de l'effectuer.



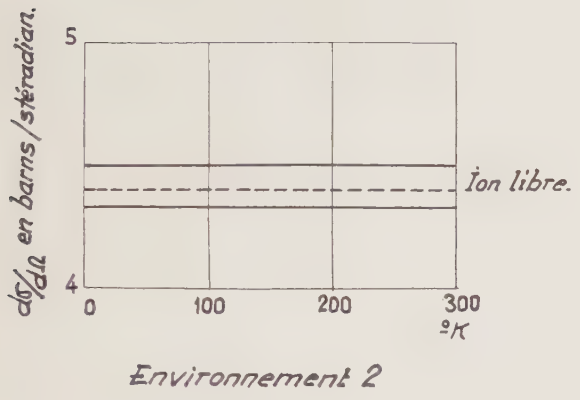
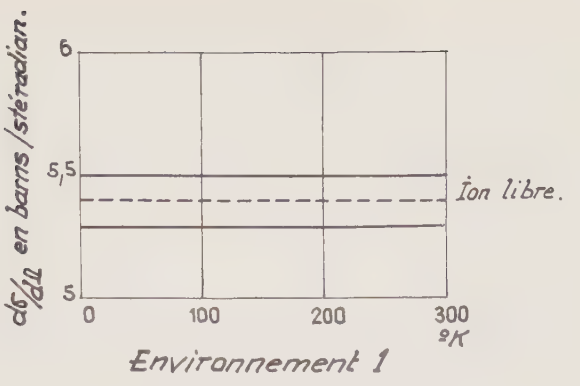


Figure II-10 (b) - Variation de la section efficace totale de l'erbium avec la température. (λ_o = 1,141 Å).



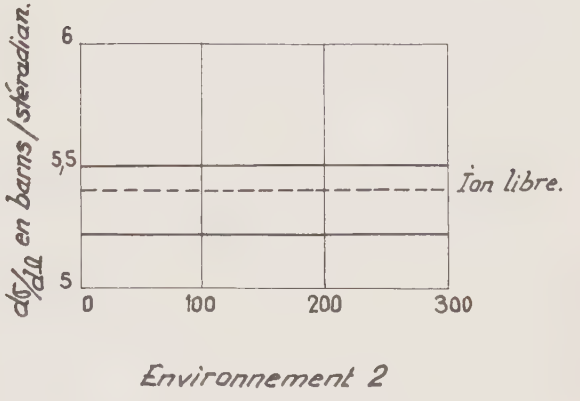


Figure II-10 (a) - Variation de la section efficace totale de l'holmium avec la température. (λ_o = 1,141 Å).

ii) On peut tenter de trouver des corps plus simples. L'oxyde de cérium Ce_2O_3, dont la structure est compliquée, a pourtant le privilège que les niveaux peuvent être décomposés au plus en trois doublets de Kramers ; il constituerait un cas plus favorable que les précédents. Il semble, malheureusement, que son obtention en proportions quantitatives pose des problèmes de chimie de préparation qu'il a été impossible de surmonter à Saclay. L'oxydation du sesquioxyde en oxyde CeO_2, non magnétique, est très rapide et la réduction de ce dernier délicate.

iii) Il serait intéressant de mettre en évidence des transitions entre multiplets de J différents. Les deux terres rares où les niveaux J sont suffisamment voisins possèdent malheureusement des sections efficaces d'absorption (respectivement 10600 barns à 2200 m/s pour le samarium et 4000 barns pour l'europium) beaucoup trop fortes pour permettre une quelconque observation.

iiii) Il n'est pas obligatoire de se cantonner au groupe des terres rares. Dans le chapitre III nous étudierons les cas des éléments du groupe du fer.

b) Cas des ions polarisés - Section efficace magnétique cohérente.

Pour terminer cette étude nous avons voulu envisager le cas des atomes polarisés. Les ions magnétiques sont alors dans l'état J_z maximal. Dans ce cas les expérimentateurs utilisent une formule pour le facteur de forme magnétique calquée sur celle que l'on établit pour les ions du groupe du fer où le moment orbital est bloqué. C'est la loi connue qui relie l'intensité à l'angle β fait par le vecteur de diffusion avec la direction du moment magnétique :

$$I = F(k)^2 \sin^2 \beta \qquad (2\text{-}25)$$

Comme nous le montrerons ci-après une telle loi existera chaque fois que l'opérateur intervenant dans le calcul de la section efficace est un moment cinétique. Elle résulte des propriétés de transformation par rotation de l'opérateur J.

Dans le cas où le moment orbital est bloqué la section efficace est essentiellement proportionnelle à :

$$| < | \vec{S}_\perp | > |^2$$

La loi (2-25) n'existera donc dans le cas des terres rares que si la section efficace est proportionnelle à :

$$| < | J_\perp | > |^2$$

c'est-à-dire dans le cas où la formule de Schwinger est applicable. La loi (2-25) ne constitue donc qu'une approximation d'ordre zéro valable pour les faibles vecteurs de diffusion. Nous en discutons ci-après les domaines de validité.

Considérons la formule (1-11) et supposons que le moment orbital est bloqué. Elle s'écrit alors :

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{M_N e g_N}{2mc}\right)^2 \sum_f \frac{p_f}{2p_o} \left\{ \left| < \Psi_f \left| \sum_n 2 s_n^+ e^{i\vec{k}.\vec{r}_n} \right| \Psi_o > \right|^2 + \left| < \Psi_f \left| \sum_n 2 s_n^- e^{i\vec{k}.\vec{r}_n} \right| \Psi_o > \right|^2 \right\} \qquad (2\text{-}26)$$

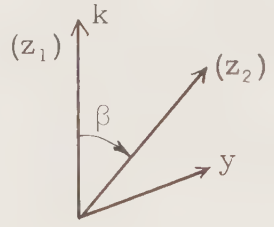
Nous pouvons intégrer les parties ne dépendant pas du spin et écrire :

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{M_N e g_N}{2mc}\right)^2 \sum_f \frac{2p_f}{p_o} | F(\vec{k}) |^2 \left\{ | < \Psi_f | S_+ | \Psi_o > |^2 + | < \Psi_f | S_- | \Psi_o > |^2 \right\} \qquad (2\text{-}27)$$

$$F(\vec{k}) = \int \varphi^* (r)\, e^{i\vec{k}.\vec{r}}\, \varphi\ (r)\, d\vec{r}$$

est le facteur de forme de l'ion qui dépend de l'angle de diffusion ; $\vec{S}$ est le spin total de l'ion :

Les référentiels de définition des fonctions de spin $|\Psi_o>$ et $|\Psi_f>$ et du spin total S (S_+ et S_- sont définis en prenant le vecteur de diffusion comme axe des z) sont différents. Nous pouvons sans perdre de généralité, choisir pour spécifier ces référentiels l'axe des y commun et perpendiculaire au vecteur $\vec{k}$ et à l'axe de quantification de $|\Psi_o>$ et $|\Psi_f>$. (Voir figure II-11).



Soit β l'angle entre les deux axes des z. Nous avons vu que S_+ et S_- peuvent être considérés comme les composantes d'un opérateur tensoriel d'ordre 1 : $\mathcal{S}$. Par une rotation d'angles d'Euler $(\omega) = (0, \beta, 0)$, on amènera le référentiel de $\vec{k}$ sur celui des fonctions $|\Psi_o>$ et $|\Psi_f>$; la section efficace deviendra :

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{M_N e g_N}{2mc}\right)^2 \sum_f 4 \frac{p_f}{p_o} \left\{ | F(\vec{k}) |^2 \left| < \Psi_f \left| \sum_{q=-1}^{1} d^1_{1,q}\, \mathcal{S}^q \right| \Psi_o > \right|^2 + \left| < \Psi_f \left| \sum_{q=-1}^{1} d^1_{-1,q}\, \mathcal{S}^q \right| \Psi_o > \right|^2 \right\}$$

Le facteur 2 provient de ce que $S_\pm = \sqrt{2}\, \mathcal{S}^{\pm 1}$.

Supposons que l'ion magnétique soit dans un état tel que :

$$|\Psi_f> = |\Psi_o> = |S S_z>$$

Les seuls éléments de matrice non nuls seront ceux pour lesquels q = 0, c'est-à-dire ceux de l'opérateur $S_z = \mathcal{S}_o$. Il vient :

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{M_N\, e\, g_N}{2\,mc}\right)^2 \; 8\,|F(\vec{k})|^2 \; S_z^2 \; |d^1_{1,o}(\beta)| = \left(\frac{M_N\, e\, g_N}{2\,mc}\right)^2 \; |F(\vec{k})|^2 \; S_z^2 \sin^2\beta \qquad (2\text{-}28)$$

On a tenu compte de la relation :

$$d^l_{m,o}(\beta) = \left[\frac{(l-m)!}{(l+m)!}\right]^{1/2} P_l^m(\cos\beta)$$

On retrouve la formule bien connue de la diffusion cohérente, applicable lorsque l'on a affaire à des atomes polarisés (1). β est alors l'angle entre la direction du vecteur de diffusion et celle des spins des ions ($S_z = S$).

On emploie une formule du même type pour la diffusion cohérente des ions de terre rare où le moment orbital n'est pas bloqué. On remplace S par $g_j J$. Cette manière de faire est une approximation d'ordre zéro qui n'est valable qu'autant que la formule simplifiée (1-80 b) est utilisable. Nous allons examiner le domaine de validité de cette approximation.

Supposons que les ions de terre rare sont dans l'état J_z maximal, par suite de l'influence d'un champ d'origine magnétique par exemple. On aura :

$$|\Psi_o\rangle = |\Psi_f\rangle = |JJ\rangle ; \qquad p_o = p_f .$$

Soit β l'angle entre le vecteur $\vec{k}$ et la direction de $\vec{J}$.

Dans la formule (2-1) nous devons calculer l'élément de matrice :

$$\langle JJ|\,\mathcal{Y}^{\pm 1}_{2\nu+1}(k)\,|JJ\rangle_1 = \sum_{q=-(2\nu+1)}^{2\nu+1} d^{2\nu+1}_{q,\pm 1}(\beta)\,\langle JJ|\,\mathcal{Y}^q_{2\nu+1}\,|JJ\rangle$$

$$= \mp\, P^1_{2\nu+1}(\cos\beta)\,\frac{(2J)!\,(4\nu+3)^{1/2}}{[(2J+2\nu+2)!\,(2J-2\nu-2)!\,(2\nu+1)(2\nu+2)]^{1/2}}$$

La section efficace devient :

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{M_N\, e\, g_N}{2\,mc}\right)^2 \frac{2J}{(2J+1)(2J+2)} \left\{ \left| \sqrt{\frac{3}{2}}\,(\mathcal{A}_o - \mathcal{B}_1)\sin\beta \; - \sqrt{\frac{7}{12}}\,\frac{(2J-1)(2J-2)}{(2J+3)(2J+4)}\,(\mathcal{A}_1 - \mathcal{B}_2)\,P_3^1(\cos\beta) + \ldots \right|^2 \right\} \qquad (2\text{-}29)$$

Pour ka = 0 cette expression se réduit à :

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{M_N\, e\, g_N}{2\,mc}\right)^2 \frac{3J}{(2J+1)(2J+2)}\,(\mathcal{G}^L_{o,1} + \mathcal{G}^S_{o,1})^2 \sin^2\beta \qquad (2\text{-}30)$$

on retrouve la loi annoncée de la dépendance angulaire. Si ka $\neq$ 0 il y aura une déviation à cette loi d'autant plus forte que ka est grand. Il faut remarquer que, concurremment à cet effet, se produit une diminution de la section efficace. Posons :

$$I(\beta, k) = \frac{1}{\sin^2\beta}\,\frac{d\sigma}{d\Omega}(\beta, k) \qquad (2\text{-}31)$$

Nous avons déterminé en fonction de β et pour diverses valeurs de k^2a^2 les rapports (2) :

$$R_1 = \frac{I(\beta, ka)}{I(0, ka)} \qquad \text{et} \qquad R_2 = \frac{I(\beta, ka)}{I(0, 0)} \qquad (2\text{-}32)$$

---

(1) On pouvait réétablir cette formule directement en partant de (1-8).

(2) Voir fig. II-12.

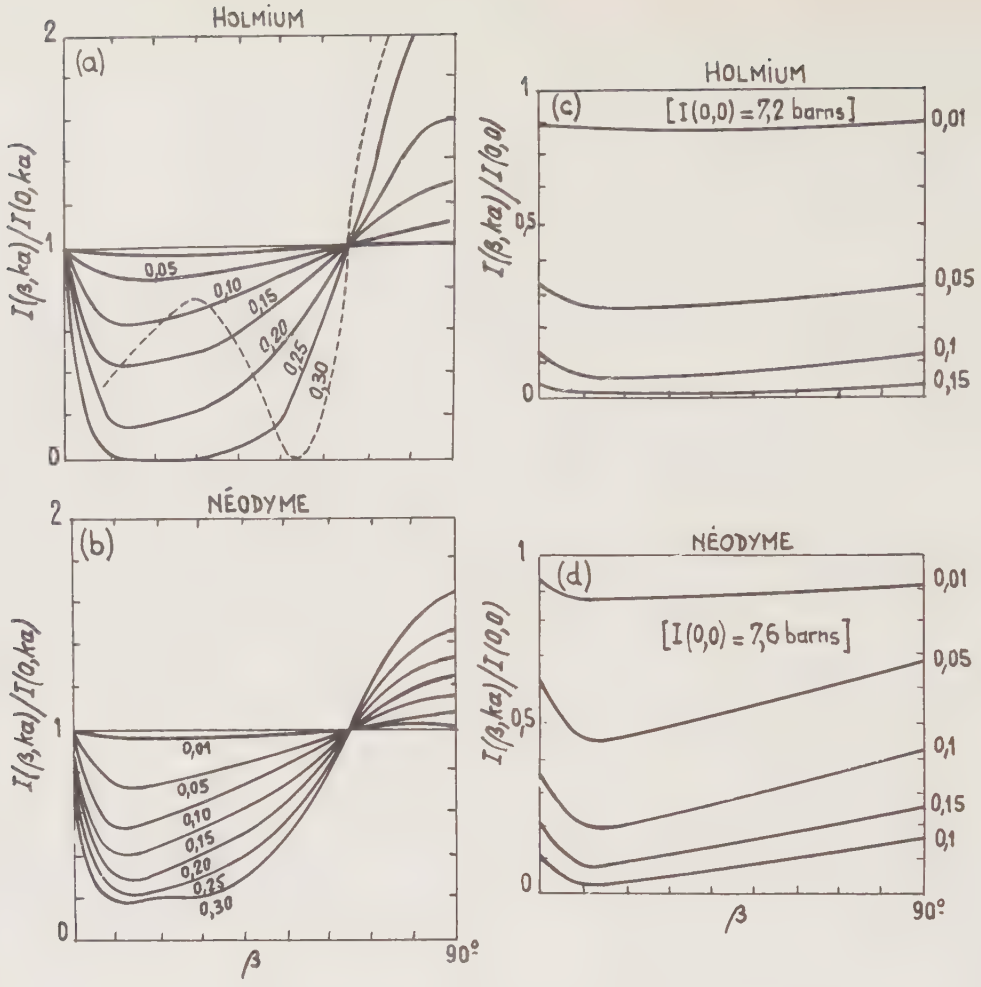


Figure II-12 - Ecart à la loi $I \simeq \sin^2\beta$ tracé pour diverses valeurs de k^2a^2.

(a) Valeur du rapport R_2 pour l'holmium

(b) " " " R_2 " le néodyme

(c) " " " R_1 " l'holmium

(d) " " " R_1 " le néodyme

(Voir texte équation (5.4.a))

Dans le cas du néodyme, par exemple, pour $k^2a^2 = 0,1$, R tombe à 0,55, R_1 valant 0,20 pour un angle β de 10°. Si 2ϑ est l'angle de diffusion et si la longueur d'onde des neutrons incidents est de l'ordre de 1 Å, on aura :

$$ka = \frac{8\pi a_c \sin\vartheta}{Z^* \lambda_o} \simeq 0,3$$

ce qui entraîne :

$$\sin\vartheta \simeq 0,6 \qquad 2\vartheta \simeq 75°.$$

Cet effet devrait pouvoir être mis en évidence expérimentalement.

On peut en tout cas conclure qu'il y a quelque danger à adopter la loi habituelle de dépendance angulaire de la section efficace si la quantité ka n'est pas suffisamment faible (ka < 0,1 par exemple).

TABLEAU II-1

Z	Ion	Etat fondamental	Etat excité	Distance théorique cm^{-1}	Distance expérimentale cm^{-1}	Méthode de détermination	Référence	Section efficace d'absorption à 2 200 m/s en barns
58	Ce^{+++}	$4f^1\ ^2F_{5/2}$	$^2F_{7/2}$	2 100	2 240	Spectro.	Lang (1936)	0,8
59	Pr^{+++}	$4f^2\ ^3H_4$	$^3H_5$ $^3H_6$	2 000 4 400	~ 5 200	"	Spedding (1940)	11,2
60	Nd^{+++}	$4f^3\ ^4I_{9/2}$	$^4I_{11/2}$ $^4I_{13/2}$	1 800 6 500	5 200	"	Gobrecht (1938)	44,4
61	Pm^{+++}	$4f^4\ ^5I_4$	$^5I_5$	1 500	?			?
62	Sm^{+++}	$4f^5\ ^6H_{5/2}$	$^6H_{7/2}$	980	1 100	Suscept.	Van Vleck (1932)	10 600
63	Eu^{+++}	$4f^6\ ^7F_0$	$^7F_1$	270	300 340	Suscept. Spectro.	Van Vleck (1938) Hellwege et Kahle (1950)	4 000
64	Gd^{+++}	$4f^7\ ^8S_{7/2}$	-	-	-			35 000
65	Tb^{+++}	$4f^8\ ^7F_6$	$^7F_5$	2 000	?			44
66	Dy^{+++}	$4f^9\ ^6H_{15/2}$	$^6H_{13/2}$ $^6H_{11/2}$	3 300 6 100	6 000	Spectro	Gobrecht (1938)	890
67	Ho^{+++}	$4f^{10}\ ^5I_8$	$^5I_7$	4 800	5 050	"		64
68	Er^{+++}	$4f^{11}\ ^4I_{15/2}$	$^4I_{13/2}$	6 500	8 000	"		166
69	Tm^{+++}	$4f^{12}\ ^3H_6$	$^3H_5$	8 400	8 250	"	Bethe et Spedding (1937)	118
70	Yb^{+++}	$4f^{13}\ ^2F_{7/2}$	$^2F_{5/2}$	10 500	10 300	"	Gobrecht (1938)	35,7

Les valeurs des distances sont tirées de l'article d'Elliot et Stevens (Proc. Roy. Soc. A 218, 553, 1953) celles des sections efficaces de la thèse de W.C. Koehler (1953).

TABLEAU II - 2 A

ν	0	1	2	3
$G(1 \mid P_\nu^{\dagger} \mid 1)$	-2,64575	0,611009	-0,376051	0,354281
$\alpha^{l}_{\nu,\nu+1}$	$-4\sqrt{2}$	$-12\sqrt{2}/\sqrt{3}\sqrt{7}$	$-4\sqrt{5}/\sqrt{11}$	0
$\alpha^{l}_{\nu,\nu-1}$	0	$\sqrt{6}$	$2\sqrt{11}/\sqrt{7}$	$\sqrt{5}\sqrt{6}/\sqrt{11}$

	ν	0	1	2	3	4	5	6	7
Ce^{+++}	$G(l_1 \ldots l_n \mid \mathcal{Y}_\nu \mid l_1 \ldots l_n)$	1	1	1	1	1	1	1	1
	$G(LSJ \mid \mathcal{Y}_\nu \mid LSJ)$	0,925818	0,903504	0,857142	0,782460	0,670062	0,494872	0	0
Pr^{+++}	$G(l_1 \ldots l_n \mid \mathcal{Y}_\nu \mid l_1 \ldots l_n)$	1,25356	0,99103	0,532662	0	-0,454258	-0,681381	-0,580778	-
	$G(LSJ \mid \mathcal{Y}_\nu \mid LSJ)$	0,904536	0,886259	0,849696	0,794818	0,721569	0,629837	0,519377	0,389533
Nd^{+++}	$G(l_1 \ldots l_n \mid \mathcal{Y}_\nu \mid l_1 \ldots l_n)$	1,36277	0,849837	0,14794	-0,295874	-0,212362	0,260089	0,594215	-
	$G(LSJ \mid \mathcal{Y}_\nu \mid LSJ)$	0,877058	0,856893	0,817015	0,758346	0,682311	0,590899	0,486755	0,373324
Ho^{+++}	$G(l_1 \ldots l_n \mid \mathcal{Y}_\nu \mid l_1 \ldots l_n)$	1,36277	0,637377	-0,110953	-0,221906	0,159271	0,195067	-0,445667	-
	$G(LSJ \mid \mathcal{Y}_\nu \mid LSJ)$	1,143544	1,122937	1,082276	1,022654	0,945722	0,853675	0,749260	0,635768
Er^{+++}	$G(l_1 \ldots l_n \mid \mathcal{Y}_\nu \mid l_1 \ldots l_n)$	1,36277	0,849837	0,14794	-0,295874	-0,212362	0,260089	0,594215	-
	$G(LSJ \mid \mathcal{Y}_\nu \mid LSJ)$	1,109400	1,093436	1,061736	1,014755	0,953197	0,878021	0,720476	0,692136

(1) Voir page 17 .

TABLEAU II - 2 B

	$\mathcal{G}^{L}_{2\nu,2\nu+1}$				$\mathcal{G}^{L}_{2\nu,2\nu-1}$			
ν	0	1	2	3	0	1	2	3
Ce^{+++}	6,7613	-4,4262	2,2582	0	0	3,3806	-3,3197	1,8820
Pr^{+++}	13,145	0	-3,9170	0	0	6,573	0	-3,2640
Nd^{+++}	16,349	3,8078	2,1040	0	0	8,1731	2,8558	1,7535
Ho^{+++}	21,424	5,135	3,040	0	0	10,712	3,8512	2,5332
Er^{+++}	20,862	5,0952	3,1264	0	0	10,430	3,8213	2,6053

	$\mathcal{G}^{S}_{2\nu,2\nu+1}$				$\mathcal{G}^{S}_{2\nu.2\nu-1}$			
ν	0	1	2	3	0	1	2	3
Ce^{+++}	-1,6903	0,8853	-0,3764	0	0	-1,3522	2,2132	-3,7639
Pr^{+++}	-4,3815	1,145	0,6525	-0,526	0	-1,2655	-1,5610	2,8455
Nd^{+++}	-7,006	0,4760	0,4676	0,8996	0	-0,4954	-0,9809	-3,6607
Ho^{+++}	14,2825	1,027	1,520	5,1075	0	-0,4762	-0,7002	-1,9486
Er^{+++}	10,429	-1,019	-1,5632	-5,563	0	0,4637	0,6947	2,0041

TABLEAU II - 3

	g_J	$\frac{d\sigma}{d\Omega}$ (barns/stéradian) $k = 0$
Ce^{+++}	6/7	0,309
Pr^{+++}	4/5	0,615
Nd^{+++}	8/11	0,628
Ho^{+++}	5/4	5,40
Er^{+++}	6/5	4,40

TABLEAU II - 4 A

Ion	J	β	déc.	d	Energie	Fonctions d'onde
Ce^{3+}	$\frac{5}{2}$	$\frac{2}{5 \times 7 \times 9}$	Γ_7	2	$-8A/105$	$\frac{1}{\sqrt{6}} \left\vert \frac{5}{2} \pm \frac{5}{2} \right\rangle - \frac{\sqrt{5}}{\sqrt{6}} \left\vert \frac{5}{2} \mp \frac{3}{2} \right\rangle$
			Γ_8	4	$4A/105$	$\frac{\sqrt{5}}{\sqrt{6}} \left\vert \frac{5}{2} \mp \frac{5}{2} \right\rangle + \frac{1}{\sqrt{6}} \left\vert \frac{5}{2} \mp \frac{3}{2} \right\rangle$ $\left\vert \frac{5}{2} \pm \frac{1}{2} \right\rangle$
Pr^{3+}	4	$\frac{-4}{3^2 \times 5 \times 11^2}$	Γ_1	1	$\frac{-2^4 \times 7 \times A}{3 \times 5 \times 11^2}$	$\frac{\sqrt{5}}{2\sqrt{6}} \vert 4\ 4 \rangle + \frac{\sqrt{7}}{2\sqrt{3}} \vert 4\ 0 \rangle + \frac{\sqrt{5}}{2\sqrt{6}} \vert 4\ -4 \rangle$
			Γ_3	2	$\frac{-16A}{3 \times 5 \times 11^2}$	$\frac{\sqrt{7}}{2\sqrt{6}} \vert 4\ 4 \rangle - \frac{\sqrt{5}}{2\sqrt{3}} \vert 4\ 0 \rangle + \frac{\sqrt{7}}{2\sqrt{6}} \vert 4\ -4 \rangle$ $\frac{\sqrt{2}}{2} \vert 4\ 2 \rangle + \frac{\sqrt{2}}{2} \vert 4\ -2 \rangle$
			Γ_4	3	$\frac{-8 \times 7 \times A}{3 \times 5 \times 11^2}$	$\frac{\sqrt{2}}{2} \vert 4\ 4 \rangle - \frac{\sqrt{2}}{2} \vert 4\ -4 \rangle$ $\frac{1}{2\sqrt{2}} \vert 4\ 3 \rangle + \frac{\sqrt{7}}{2\sqrt{2}} \vert 4\ -1 \rangle$ $\frac{\sqrt{7}}{2\sqrt{2}} \vert 4\ 1 \rangle + \frac{1}{2\sqrt{2}} \vert 4\ -3 \rangle$
			Γ_5	3	$\frac{8 \times 13 \times A}{3 \times 5 \times 11^2}$	$\frac{\sqrt{2}}{2} \vert 4\ 2 \rangle - \frac{\sqrt{2}}{2} \vert 4\ -2 \rangle$ $\frac{-\sqrt{7}}{2\sqrt{2}} \vert 4\ 3 \rangle + \frac{1}{2\sqrt{2}} \vert 4\ -1 \rangle$ $\frac{-1}{2\sqrt{2}} \vert 4\ 1 \rangle + \frac{\sqrt{7}}{2\sqrt{2}} \vert 4\ -3 \rangle$
Nd^{3+}	$\frac{9}{2}$	$\frac{-8 \times 17}{3^3 \times 11^3 \times 13}$	Γ_6	2	$\frac{2^3 \times 3 \times 7^2}{5} \beta A$	$\frac{1}{2\sqrt{2}\sqrt{3}} \left[3 \left\vert \frac{9}{2} - \frac{9}{2} \right\rangle + \sqrt{2}\sqrt{7} \left\vert \frac{9}{2} \pm \frac{1}{2} \right\rangle + \left\vert \frac{9}{2} \mp \frac{7}{2} \right\rangle \right]$
			$\Gamma_8^{(1)}$	4	$(7^2 - 5\sqrt{7}\sqrt{103})\ \beta A$	$\frac{1}{\sqrt{2}\sqrt{7}\sqrt{103}} \left[\sqrt{\sqrt{7}\sqrt{103} - 14} \left\vert \frac{9}{2} \pm \frac{3}{2} \right\rangle - \sqrt{\sqrt{7}\sqrt{103} + 14} \left\vert \frac{9}{2} \mp \frac{5}{2} \right\rangle \right]$ $\frac{1}{12\sqrt{103}} \left[3\sqrt{5\sqrt{103} - 19\sqrt{7}} \left\vert \frac{9}{2} \pm \frac{9}{2} \right\rangle - \sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{5\sqrt{103} - 11\sqrt{7}} \left\vert \frac{9}{2} \pm \frac{1}{2} \right\rangle + \sqrt{3}\sqrt{23\sqrt{103} + 79\sqrt{7}} \left\vert \frac{9}{2} \mp \frac{7}{2} \right\rangle \right]$
			$\Gamma_8^{(2)}$	4	$(7^2 + 5\sqrt{7}\sqrt{103})\ \beta A$	$\frac{1}{\sqrt{2}\sqrt{7}\sqrt{103}} \left[\sqrt{\sqrt{7}\sqrt{103} + 14} \left\vert \frac{9}{2} \pm \frac{3}{2} \right\rangle + \sqrt{\sqrt{7}\sqrt{103} - 14} \left\vert \frac{9}{2} \mp \frac{5}{2} \right\rangle \right]$ $\frac{1}{12\sqrt{103}} \left[3\sqrt{5\sqrt{103} + 19\sqrt{7}} \left\vert \frac{9}{2} \pm \frac{9}{2} \right\rangle - \sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{5\sqrt{103} + 11\sqrt{7}} \left\vert \frac{9}{2} \pm \frac{1}{2} \right\rangle + \sqrt{3}\sqrt{23\sqrt{103} - 79\sqrt{7}} \left\vert \frac{9}{2} \mp \frac{7}{2} \right\rangle \right]$

TABLEAU II - 4 B

Ion	J	β	déc.	d	Energie	Fonctions d'onde
Ho^{3+}	8	$\frac{-1}{2 \times 3 \times 5 \times 7 \times 11 \times 13}$	Γ_1	1	$\frac{-28}{5 \times 11 \times 13}$ A	$0,4114\ (\|8\ 8\rangle + \|8\ -8\rangle) + 0,2700\ (\|8\ 4\rangle + \|8\ -4\rangle) + 0,7181\ \|8\ 0\rangle$
			$\Gamma_3^{(1)}$	2	-0,03526 A	$0,0411\ (\|8\ 8\rangle + \|8\ -8\rangle) - 0,6365\ (\|8\ 4\rangle + \|8\ -4\rangle) + 0,4316\ \|8\ 0\rangle$ $0,6939\ (\|8\ 6\rangle + \|8\ -6\rangle) - 0,1358\ (\|8\ 2\rangle + \|8\ -2\rangle)$
			$\Gamma_3^{(2)}$	2	0,02967 A	$-0,5736\ (\|8\ 8\rangle + \|8\ -8\rangle) + 0,1841\ (\|8\ 4\rangle + \|8\ -4\rangle) + 0,5459\ \|8\ 0\rangle$ $0,1358\ (\|8\ 6\rangle + \|8\ -6\rangle) + 0,6939\ (\|8\ 2\rangle + \|8\ -2\rangle)$
			$\Gamma_4^{(1)}$	3	-0,03670 A	$0,7049\ (\|8\ 8\rangle - \|8\ -8\rangle) + 0,0562\ (\|8\ 4\rangle - \|8\ -4\rangle)$ $-0,0841\ \|8\ 7\rangle - 0,4666\ \|8\ 3\rangle - 0,8547\ \|8\ -1\rangle - 0,2111\ \|8\ -5\rangle$ $-0,2111\ \|8\ 5\rangle - 0,8547\ \|8\ 1\rangle - 0,4666\ \|8\ -3\rangle - 0,0841\ \|8\ -7\rangle$
			$\Gamma_4^{(2)}$	3	0,02712 A	$0,0562\ (\|8\ 8\rangle - \|8\ -8\rangle) - 0,7049\ (\|8\ 4\rangle - \|8\ -4\rangle)$ $0,6680\ \|8\ 7\rangle - 0,6442\ \|8\ 3\rangle + 0,2070\ \|8\ -1\rangle + 0,3223\ \|8\ -5\rangle$ $-0,3223\ \|8\ 5\rangle - 0,2070\ \|8\ 1\rangle + 0,6442\ \|8\ -3\rangle - 0,6680\ \|8\ -7\rangle$
			$\Gamma_5^{(1)}$	3	0,00293 A	$-0,7399\ \|8\ 7\rangle - 0,5520\ \|8\ 3\rangle + 0,3224\ \|8\ -1\rangle + 0,2094\ \|8\ -5\rangle$ $0,3177\ (\|8\ 6\rangle - \|8\ -6\rangle + 0,6317\ (\|8\ 2\rangle - \|8\ -2\rangle)$ $0,2094\ \|8\ 5\rangle + 0,3224\ \|8\ 1\rangle - 0,5520\ \|8\ -3\rangle - 0,7399\ \|8\ -7\rangle$
			$\Gamma_5^{(2)}$	3	0,03343 A	$0,0848\ \|8\ 7\rangle - 0,2500\ \|8\ 3\rangle + 0,3501\ \|8\ -1\rangle - 0,8987\ \|8\ -5\rangle$ $-0,6317\ (\|8\ 6\rangle - \|8\ -6\rangle) + 0,3177\ (\|8\ 2\rangle - \|8\ -2\rangle)$ $0,8987\ \|8\ 5\rangle - 0,3501\ \|8\ 1\rangle + 0,2500\ \|8\ -3\rangle - 0,0848\ \|8\ -7\rangle$

TABLEAU II - 4 C

Ion	J	β	déc.	d		Fonctions d'onde
Er^{3+}	$\frac{15}{2}$	$\frac{2}{3^2 \times 5 \times 7 \times 11 \times 13}$	Γ_6	2	0,039161 A	$0,5818\ \left\|\frac{15}{2}\ \pm\frac{15}{2}\right\rangle + 0,3307\ \left\|\frac{15}{2}\ \pm\frac{7}{2}\right\rangle + 0,7181\ \left\|\frac{15}{2}\ \mp\frac{1}{2}\right\rangle + 0,1909\ \left\|\frac{15}{2}\ \mp\frac{9}{2}\right\rangle$
			Γ_7	2	- 0,003456 A	$0,6333\ \left\|\frac{15}{2}\ \pm\frac{13}{2}\right\rangle + 0,5818\ \left\|\frac{15}{2}\ \pm\frac{5}{2}\right\rangle - 0,4507\ \left\|\frac{15}{2}\ \mp\frac{3}{2}\right\rangle - 0,2394\ \left\|\frac{15}{2}\ \mp\frac{11}{2}\right\rangle$
			$\Gamma_8^{(1)}$	4	- 0,03449 A	$0,0254\ \left\|\frac{15}{2}\ \pm\frac{15}{2}\right\rangle - 0,3664\ \left\|\frac{15}{2}\ \pm\frac{7}{2}\right\rangle + 0,3745\ \left\|\frac{15}{2}\ \mp\frac{1}{2}\right\rangle - 0,8514\ \left\|\frac{15}{2}\ \mp\frac{9}{2}\right\rangle$ $0,0908\ \left\|\frac{15}{2}\ \pm\frac{13}{2}\right\rangle - 0,2156\ \left\|\frac{15}{2}\ \pm\frac{5}{2}\right\rangle + 0,3342\ \left\|\frac{15}{2}\ \mp\frac{3}{2}\right\rangle - 0,9130\ \left\|\frac{15}{2}\ \mp\frac{11}{2}\right\rangle$
			$\Gamma_8^{(2)}$	4	- 0,01884 A	$0,0764\ \left\|\frac{15}{2}\ \pm\frac{15}{2}\right\rangle - 0,8575\ \left\|\frac{15}{2}\ \pm\frac{7}{2}\right\rangle + 0,2097\ \left\|\frac{15}{2}\ \mp\frac{1}{2}\right\rangle + 0,4636\ \left\|\frac{15}{2}\ \mp\frac{9}{2}\right\rangle$ $0,7605\ \left\|\frac{15}{2}\ \pm\frac{13}{2}\right\rangle - 0,5424\ \left\|\frac{15}{2}\ \pm\frac{5}{2}\right\rangle + 0,2177\ \left\|\frac{15}{2}\ \mp\frac{3}{2}\right\rangle + 0,2834\ \left\|\frac{15}{2}\ \mp\frac{11}{2}\right\rangle$
			$\Gamma_8^{(3)}$	4	0,03548 A	$0,8093\ \left\|\frac{15}{2}\ \pm\frac{15}{2}\right\rangle - 0,1453\ \left\|\frac{15}{2}\ \pm\frac{7}{2}\right\rangle - 0,5478\ \left\|\frac{15}{2}\ \mp\frac{1}{2}\right\rangle - 0,1543\ \left\|\frac{15}{2}\ \mp\frac{9}{2}\right\rangle$ $0,1121\ \left\|\frac{15}{2}\ \pm\frac{13}{2}\right\rangle + 0,5664\ \left\|\frac{15}{2}\ \pm\frac{5}{2}\right\rangle + 0,7986\ \left\|\frac{15}{2}\ \mp\frac{3}{2}\right\rangle + 0,1697\ \left\|\frac{15}{2}\ \mp\frac{11}{2}\right\rangle$

TABLEAU II - 5 A

Valeur des coefficients $\mathcal{C}_\nu$.

CERIUM

ν	$\Gamma_7\,\Gamma_7$	$\Gamma_7\,\Gamma_8$	$\Gamma_8\,\Gamma_8$
0	0,2381	0,7619	1,2381
1	1,4815	0,8518	3,8148
2	1,2804	2,3862	4,9471
3	0	0	0

PRASEODYME

ν	$\Gamma_1\,\Gamma_1$	$\Gamma_1\,\Gamma_4$	$\Gamma_1\,\Gamma_3$	$\Gamma_1\,\Gamma_5$
0	0	1/3	0	0
1	0	0,2475	0	0,5303
2	0	0,5812	0,6154	0,0256
3	0	0,3380	0,3846	0,9441

ν	$\Gamma_4\,\Gamma_4$	$\Gamma_4\,\Gamma_3$	$\Gamma_4\,\Gamma_5$
0	0,025	0,4667	0,175
1	0,2970	0,6646	1,1242
2	1,3494	0,8291	0,9070
3	1,3287	1,0396	2,2937

ν	$\Gamma_3\,\Gamma_3$	$\Gamma_3\,\Gamma_5$
0	0	0,2
1	0,3636	0,5272
2	0	1
3	0,6364	1,2727

ν	$\Gamma_5\,\Gamma_5$
0	0,625
1	0,1515
2	1,7340
3	0,4895

NEODYME

ν	$\Gamma_6\,\Gamma_6$	$\Gamma_6\,\Gamma_8^{(1)}$	$\Gamma_6\,\Gamma_8^{(2)}$
0	0,2444	0,3252	0,0303
1	0,0609	0,4561	0,8829
2	0,5778	0,6536	0,9686
3	1,1883	0,9339	0,8778

ν	$\Gamma_8^{(1)}\Gamma_8^{(1)}$	$\Gamma_8^{(1)}\Gamma_8^{(2)}$
0	0,5667	0,2881
1	0,9071	1,4367
2	2,0521	1,6943
3	3,2673	1,7988

ν	$\Gamma_8^{(2)}\Gamma_8^{(2)}$
0	0,8816
1	0,4803
2	1,7371
3	3,3234

ERBIUM

ν	$\Gamma_8^{(1)}\Gamma_8^{(1)}$	$\Gamma_8^{(1)}\Gamma_8^{(2)}$	$\Gamma_8^{(1)}\Gamma_7$	$\Gamma_8^{(1)}\Gamma_8^{(3)}$	$\Gamma_8^{(1)}\Gamma_6$
0	0,5146	0,2180	0,0148	0,0012	0,0014
1	0,2890	0,7242	0,4142	0,2450	0,0777
2	0,6133	0,2958	0,1997	1,0551	0,5861
3	0,4272	0,7503	0,4504	1,3707	0,7513

ν	$\Gamma_8^{(2)}\Gamma_8^{(2)}$	$\Gamma_8^{(2)}\Gamma_7$	$\Gamma_8^{(2)}\Gamma_8^{(3)}$	$\Gamma_8^{(2)}\Gamma_6$
0	0,3264	0,1445	0,0385	0,0226
1	0,3100	0,0650	0,4668	0,1840
2	0,7103	0,5645	0,7141	0,4652
3	0,8268	0,2925	1,3982	0,4821

ν	$\Gamma_7\,\Gamma_7$	$\Gamma_7\,\Gamma_8^{(3)}$	$\Gamma_7\,\Gamma_6$
0	0,1417	0,0741	0
1	0,0004	0,1735	0,2218
2	0,0676	0,5053	0,0378
3	0,4667	0,2729	0,3925

ν	$\Gamma_8^{(3)}\Gamma_8^{(3)}$	$\Gamma_8^{(3)}\Gamma_6$
0	0,3956	0,2406
1	0,6322	0,2326
2	0,2573	0,2182
3	0,5883	0,1199

ν	$\Gamma_6\,\Gamma_6$
0	0,1103
1	0,1588
2	0,0676
3	0,1292

TABLEAU II - 5 B
Valeur des coefficients $\mathcal{C}_\nu$.

TABLEAU II - 5 C
Valeur des coefficients $\mathfrak{C}_\nu$.

HOLMIUM

ν	$\Gamma_1\Gamma_1$	$\Gamma_1\Gamma_3^{(1)}$	$\Gamma_1\Gamma_3^{(2)}$	$\Gamma_1\Gamma_4^{(1)}$	$\Gamma_1\Gamma_4^{(2)}$	$\Gamma_1\Gamma_5^{(1)}$	$\Gamma_1\Gamma_5^{(2)}$
0	0	0	0	0,1667	0,0098	0	0
1	0	0	0	0,1906	0,0514	0,1409	0,0289
2	0	0,0113	0,0468	0,1288	0,2302	0,0253	0,2046
3	0	0,0254	0,3635	0,0704	0,025	0,2141	0,1839

ν	$\Gamma_3^{(1)}\Gamma_3^{(1)}$	$\Gamma_3^{(1)}\Gamma_3^{(2)}$	$\Gamma_3^{(1)}\Gamma_4^{(1)}$	$\Gamma_3^{(1)}\Gamma_4^{(2)}$	$\Gamma_3^{(1)}\Gamma_5^{(1)}$	$\Gamma_3^{(1)}\Gamma_5^{(2)}$
0	0	0	0,3014	0,0134	0,0379	0,0001
1	0,0050	0,0601	0,4147	0,1692	0,1197	0,0548
2	0	0,2724	0,2162	0,1267	0,3725	0,2949
3	0,0743	0,1412	0,1416	0,6070	0,1822	0,5930

ν	$\Gamma_3^{(2)}\Gamma_3^{(2)}$	$\Gamma_3^{(2)}\Gamma_4^{(1)}$	$\Gamma_3^{(2)}\Gamma_4^{(2)}$	$\Gamma_3^{(2)}\Gamma_5^{(1)}$	$\Gamma_3^{(2)}\Gamma_5^{(2)}$
0	0	0,0002	0,0967	0,0390	0,2170
1	0,1411	0,0947	0,3037	0,1343	0,0896
2	0	0,3184	0,0969	0,2633	0,2963
3	0,0965	0,4714	0,3548	0,1862	0,1510

ν	$\Gamma_4^{(1)}\Gamma_4^{(1)}$	$\Gamma_4^{(1)}\Gamma_4^{(2)}$	$\Gamma_4^{(1)}\Gamma_5^{(1)}$	$\Gamma_4^{(1)}\Gamma_5^{(2)}$
0	0,0009	0,0156	0,0427	0,0018
1	0,0070	0,1988	0,2689	0,0604
2	0,0273	0,3800	0,3725	0,4980
3	0,1160	0,5886	0,4379	0,8212

ν	$\Gamma_4^{(2)}\Gamma_4^{(2)}$	$\Gamma_4^{(2)}\Gamma_5^{(1)}$	$\Gamma_4^{(2)}\Gamma_5^{(2)}$
0	0,2069	0,1125	0,0746
1	0,0070	0,1482	0,3568
2	0,3766	0,5137	0,2171
3	0,4947	0,4371	0,1398

ν	$\Gamma_5^{(1)}\Gamma_5^{(1)}$	$\Gamma_5^{(1)}\Gamma_5^{(2)}$
0	0,2877	0,0095
1	0	0,4233
2	0,1171	0,2767
3	0,8248	0,3647

ν	$\Gamma_5^{(2)}\Gamma_5^{(2)}$
0	0,2264
1	0,2215
2	0,1536
3	0,3934

TABLEAU II-6

$$V_2^0 = \sum_n (3\, z_n^2 - r_n^2)$$

$$V_4^0 = \sum_n (35\, z_n^4 - 30\, r_n^2 z_n^2 + 3\, r_n^4)$$

$$V_4^1 = \sum_n (x_n^4 + y_n^4 + z_n^4 - \frac{3}{5}\, r_n^4)$$

$$V_4^2 = \sum_n [\,2\, z_n^4 - x_n^4 - y_n^4 - \frac{6}{7}\,(2\, z_n^2 - x_n^2 - y_n^2)\, r_n^2\,]$$

$$V_4^3 = \sum_n [\,x_n^4 - y_n^4 - \frac{6}{7}\,(x_n^2 - y_n^2)\, r_n^2\,]$$

$$V_6^0 = \sum_n [\,231\, z_n^6 - 315\, r_n^2 z_n^4 + 105\, r_n^4 z_n^2 - 5\, r_n^3\,]$$

$$V_6^1 = \sum_n 231\left[x_n^2 y_n^2 z_n^2 + (x_n^4 + y_n^4 + z_n^4 - \frac{3}{5}\, r_n^4)\,\frac{r_n^2}{22} - \frac{r_n^6}{105}\right]$$

$$V_6^2 = \sum_n [\,x_n^4 (y_n^2 - z_n^2) + y_n^4 (z_n^2 - x_n^2) + z_n^4 (x_n^2 - y_n^2)\,]$$

$$V_6^3 = \sum_n [\,2\, z_n^6 - x_n^6 - y_n^6 - 15\, x_n^2 z_n^4 - 15\, y_n^2 z_n^4 - 15\, z_n^2 x_n^4 - 15\, z_n^2 y_n^4\,]$$

$$V_6^4 = \sum_n \left\{ 11\,(x_n^6 - y_n^6) - \frac{15}{11}[\,x_n^4 - y_n^4 - \frac{6}{7}\,(x_n^2 - y_n^2)\, r_n^2\,]\, r_n^2 - \frac{5}{7}\,(x_n^2 - y_n^2)\, r_n^4 \right\}$$

$$V_6^6 = \sum_n [\,x_n^6 - 15\, x_n^4 y_n^2 + 15\, x_n^2 y_n^4 - y_n^6\,]$$

TABLEAU II-7

TERME	ΔM	ELEMENT DE MATRICE
$\langle JM' \mid V_2^0 \mid JM \rangle$	0	$\alpha_J [3M^2 - J(J+1)]$
$\langle JM' \mid V_4^0 \mid JM \rangle$	0	$\beta_J [35M^4 - 30J(J+1)M^2 + 25M^2 - 6J(J+1) + 3J^2(J+1)^2]$
$\langle JM' \mid V_4^{-1} \mid JM \rangle$	0	$\beta_J \left\{ \frac{7}{4} M^4 + \frac{M^2}{4} [5 - 6J(J+1)] + \frac{3}{20} (J-1)\, J(J+1)(J+2) \right\}$
	± 4	$\frac{\beta_J}{8} \left[\frac{(J \pm M + 4)!\ (J + M)!}{(J \pm M)!\ (J \mp M - 4)!} \right]^{1/2}$
$\langle JM' \mid V_4^2 \mid JM \rangle$	0	$\frac{5\beta_J}{7} \left\{ \frac{7}{4} M^4 - \frac{M^2}{4} [5 - 6J(J+1)] + \frac{3}{20} (J-1)\, J(J+1)(J+2) \right\}$
	± 4	$\frac{-\beta_J}{8} \left[\frac{(J \pm M + 4)!\ (J \mp M)!}{(J \pm M)!\ (J \mp M - 4)!} \right]^{1/2}$
$\langle JM' \mid V_4^3 \mid JM \rangle$	± 2	$\frac{\beta_J}{14} \left[\frac{(J \pm M + 2)!\ (J \mp M)!}{(J \pm M)!\ (J \mp M - 2)!} \right]^{1/2} [J(J+1) - 7M^2 \mp 14M - 9]$
$\langle JM' \mid V_6^0 \mid JM \rangle$	0	$\gamma_J [231M^6 - 315J(J+1)M^4 + 735M^4 + 105J^2(J+1)^2M^2 - 525J(J+1)M^2 + 294M^2 - 5J^3(J+1)^3 + 40J^2(J+1)^2 - 60J(J+1)]$
$\langle JM' \mid V_6^4 \mid JM \rangle$	0	$\frac{\gamma_J}{8} [231M^6 - 315J(J+1)M^4 + 735M^4 + 105J^2(J+1)^2M^2 - 525J(J+1)M^2 + 294M^2 - 5J^3(J+1)^3 + 40J^2(J+1)^2 - 60J(J+1)]$
	± 4	$\frac{21\gamma_J}{16} \left[\frac{(J \pm M + 4)!\ (J \mp M)!}{(J \pm M)!\ (J \mp M - 4)!} \right]^{1/2} [J(J+1) - 50 - 11M(M \pm 4)]$
$\langle JM' \mid V_6^2 \mid JM \rangle$	$+2$	$\frac{\gamma_J}{32} \left[\frac{(J \pm M + 2)!\ (J \mp M)!}{(J \pm M)!\ (J \mp M - 2)!} \right]^{1/2} [33M^4 \pm 132M^3 + 273M^2 \pm 282M + 120 + J^2(J+1)^2 - 18J(J+1)M^2 \mp 36J(J+1)M - 26J(J+1)]$
	$+6$	$\frac{\gamma_J}{32} \left[\frac{(J \pm M + 6)!\ (J \mp M)!}{(J \pm M)!\ (J \mp M - 6)!} \right]^{1/2}$
$\langle JM' \mid V_6^3 \mid JM \rangle$	0	$\frac{\gamma_J}{8} [231M^6 - 315J(J+1)M^4 + 735M^4 + 105J^2(J+1)^2M^2 - 525J(J+1)M^2 + 294M^2 - 5J^3(J+1)^3 + 40J^2(J+1)^2 - 60J(J+1)]$
	± 4	$\frac{3\gamma_J}{16} \left[\frac{(J \pm M + 4)!\ (J \mp M)!}{(J \pm M)!\ (J \mp M - 4)!} \right]^{1/2} [J(J+1) - 50 - 11M(M \pm 4)]$
$\langle JM' \mid V_6^4 \mid JM \rangle$	± 2	$\frac{5\gamma_J}{32} \left[\frac{(J \pm M + 2)!\ (J \mp M)!}{(J \pm M)!\ (J \mp M - 2)!} \right]^{1/2} [33M^4 \pm 132M^3 + 273M^2 \pm 282M + 120 + J^2(J+1)^2 - 18J(J+1)M^2 \mp 36J(J+1)M - 26J(J+1)]$
	± 6	$\frac{11\gamma_J}{32} \left[\frac{(J \pm M + 6)!\ (J \mp M)!}{(J \pm M)!\ (J \mp M - 6)!} \right]^{1/2}$
$\langle JM' \mid V_6^6 \mid JM \rangle$	± 6	$\gamma_J \left[\frac{(J \pm M + 6)!\ (J \mp M)!}{(J \pm M)!\ (J \mp M - 6)!} \right]^{1/2}$

TABLEAU II-8 A

HOLMIUM. Environnement 1

Niveau	d	Energie en cm^{-1}	Fonctions d'onde
N_1	1	- 386	$\|8 \quad 0\rangle$
N_2	2	- 370	$\|8 \pm 1\rangle$
N_3	2	- 322	$\|8 \pm 2\rangle$
N_4	2	- 240	$\|8 \pm 3\rangle$
N_5	2	- 130	$\|8 \pm 4\rangle$
N_6	2	16	$\|8 \pm 5\rangle$
N_7	2	194	$\|8 \pm 6\rangle$
N_8	2	404	$\|8 \pm 7\rangle$
N_9	2	642	$\|8 \pm 8\rangle$

TABLEAU II-8 C

ERBIUM. Environnement 1

Niveau	d	Energie en cm^{-1}	Fonctions d'onde
N_1	2	- 621	$\left\|\frac{15}{2} \pm \frac{15}{2}\right\rangle$
N_2	2	- 374	$\left\|\frac{15}{2} \pm \frac{13}{2}\right\rangle$
N_3	2	- 161	$\left\|\frac{15}{2} \pm \frac{11}{2}\right\rangle$
N_4	2	18	$\left\|\frac{15}{2} \pm \frac{9}{2}\right\rangle$
N_5	2	160	$\left\|\frac{15}{2} \pm \frac{7}{2}\right\rangle$
N_6	2	267	$\left\|\frac{15}{2} \pm \frac{5}{2}\right\rangle$
N_7	2	337	$\left\|\frac{15}{2} \pm \frac{3}{2}\right\rangle$
N_8	2	372	$\left\|\frac{15}{2} \pm \frac{1}{2}\right\rangle$

TABLEAU II-8 B

HOLMIUM. Environnement 2

N	d	Energie en cm^{-1}	Fonctions d'onde
N_1	2	- 330	0,078 |8 - 8 >+ 0,204 |8 - 6 >+ 0,354 |8 - 4 >+ 0,474 |8 - 2 >+ 0,515 |8 0 >+ 0,458 |8 2 >+ 0,320 |8 4 >+ 0,154 |8 6 >+ 0,034 |8 8 > 0,139 |8 - 7 >+ 0,280 |8 - 5 >+ 0,418 |8 - 3 >+ 0,503 |8 - 1 >+ 0,500 |8 1 >+ 0,400 |8 3 >+ 0,241 |8 5 >+ 0,089 |8 7 >
N_2	2	- 222	- 0,180 |8 - 8 >- 0,357 |8 - 6 >- 0,445 |8 - 4 >- 0,318 |8 - 2 >+ 0,013 |8 0 >+ 0,358 |8 2 >+ 0,505 |8 4 >+ 0,378 |8 6 >+ 0,120 |8 8 > - 0,318 |8 - 7 >- 0,439 |8 - 5 >- 0,410 |8 - 3 >- 0,154 |8 - 1 >+ 0,207 |8 1 >+ 0,459 |8 3 >+ 0,453 |8 5 >+ 0,234 |8 7 >
N_3	2	- 117	0,436 |8 - 8 >+ 0,431 |8 - 6 >+ 0,233 |8 - 4 >- 0,185 |8 - 2 >- 0,400 |8 0 >- 0,171 |8 2 >+ 0,277 |8 4 >+ 0,466 |8 6 >- 0,228 |8 8 > 0,489 |8 - 7 >+ 0,374 |8 - 5 >+ 0,003 |8 - 3 >- 0,361 |8 - 1 >- 0,336 |8 1 >+ 0,073 |8 3 >+ 0,453 |8 5 >+ 0,408 |8 7 >
N_4	2	- 33	- 0,590 |8 8 >- 0,141 |8 - 6 >+ 0,193 |8 - 4 >+ 0,296 |8 - 2 >- 0,035 |8 0 >- 0,333 |8 2 >- 0,121 |8 4 >+ 0,388 |8 6 >+ 0,478 |8 8 > - 0,537 |8 - 7 >- 0,060 |8 - 5 >+ 0,380 |8 - 3 >+ 0,220 |8 - 1 >- 0,264 |8 1 >- 0,342 |8 3 >+ 0,169 |8 5 >+ 0,547 |8 7 >
N_5	1	15,4	0,565 |8 - 8 >- 0,236 |8 - 6 >- 0,310 |8 - 4 >+ 0,111 |8 - 2 >+ 0,297 |8 0 >- 0,036 |8 2 >- 0,314 |8 4 >+ 0,036 |8 6 >+ 0,573 |8 8 >
N_6	1	43	0,453 |8 - 7 >- 0,295 |8 - 5 >- 0,300 |8 - 3 >+ 0,271 |8 - 1 >+ 0,280 |8 1 >- 0,282 |8 3 >- 0,276 |8 5 >+ 0,556 |8 7 >
N_7	1	56	- 0,284 |8 - 8 >+ 0,457 |8 - 6 >+ 0,012 |8 - 4 >- 0,363 |8 - 2 >+ 0,013 |8 0 >+ 0,338 |8 2 >- 0,069 |8 4 >- 0,398 |8 6 >+ 0,548 |8 8 >
N_8	2	120	0,143 |8 - 8 >- 0,503 |8 - 6 >+ 0,386 |8 - 4 >+ 0,136 |8 - 2 >- 0,374 |8 0 >+ 0,057 |8 2 >+ 0,371 |8 4 >- 0,457 |8 6 >+ 0,264 |8 8 > - 0,340 |8 - 7 >+ 0,522 |8 - 5 >- 0,142 |8 - 3 >- 0,337 |8 - 1 >+ 0,276 |8 1 >+ 0,193 |8 3 >- 0,484 |8 5 >+ 0,361 |8 7 >
N_9	2	208	- 0,050 |8 - 8 >+ 0,312 |8 - 6 >- 0,511 |8 - 4 >+ 0,395 |8 - 2 >+ 0,009 |8 0 >- 0,398 |8 2 >+ 0,483 |8 4 >- 0,293 |8 6 >+ 0,070 |8 8 > 0,169 |8 - 7 >- 0,438 |8 - 5 >+ 0,502 |8 - 3 >- 0,214 |8 - 1 >- 0,234 |8 1 >+ 0,487 |8 3 >- 0,401 |8 5 >+ 0,171 |8 7 >
N_{10}	2	316	0,010 |8 - 8 >- 0,103 |8 - 6 >+ 0,280 |8 - 4 >- 0,484 |8 - 2 >+ 0,587 |8 0 >- 0,493 |8 2 >+ 0,278 |8 4 >- 0,098 |8 6 >+ 0,017 |8 8 > - 0,045 |8 - 7 >+ 0,182 |8 - 5 >- 0,387 |8 - 3 >+ 0,558 |8 - 1 >- 0,564 |8 1 >+ 0,390 |8 3 >- 0,177 |8 5 >+ 0,046 |8 7 >

TABLEAU II-8 D

ERBIUM. Environnement 2

N	d	Energie en cm^{-1}	Fonctions d'onde
N_1	2	- 305	$0,023 \left\vert \frac{15}{2} \pm \frac{15}{2} \right\rangle - 0,126 \left\vert \frac{15}{2} \pm \frac{11}{2} \right\rangle + 0,326 \left\vert \frac{15}{2} \pm \frac{7}{2} \right\rangle - 0,535 \left\vert \frac{15}{2} \pm \frac{3}{2} \right\rangle + 0,590 \left\vert \frac{15}{2} \pm \frac{1}{2} \right\rangle - 0,439 \left\vert \frac{15}{2} \pm \frac{5}{2} \right\rangle + 0,216 \left\vert \frac{15}{2} \pm \frac{9}{2} \right\rangle - 0,062 \left\vert \frac{15}{2} \pm \frac{13}{2} \right\rangle$
N_2	2	- 196	$- 0,112 \left\vert \frac{15}{2} \pm \frac{15}{2} \right\rangle + 0,341 \left\vert \frac{15}{2} \pm \frac{11}{2} \right\rangle - 0,509 \left\vert \frac{15}{2} \pm \frac{7}{2} \right\rangle + 0,344 \left\vert \frac{15}{2} \pm \frac{3}{2} \right\rangle + 0,126 \left\vert \frac{15}{2} \pm \frac{1}{2} \right\rangle - 0,479 \left\vert \frac{15}{2} \pm \frac{5}{2} \right\rangle + 0,451 \left\vert \frac{15}{2} \pm \frac{9}{2} \right\rangle - 0,214 \left\vert \frac{15}{2} \pm \frac{13}{2} \right\rangle$
N_3	2	- 108	$0,347 \left\vert \frac{15}{2} \pm \frac{15}{2} \right\rangle - 0,503 \left\vert \frac{15}{2} \pm \frac{11}{2} \right\rangle + 0,282 \left\vert \frac{15}{2} \pm \frac{7}{2} \right\rangle + 0,209 \left\vert \frac{15}{2} \pm \frac{3}{2} \right\rangle - 0,347 \left\vert \frac{15}{2} \pm \frac{1}{2} \right\rangle - 0,067 \left\vert \frac{15}{2} \pm \frac{5}{2} \right\rangle + 0,457 \left\vert \frac{15}{2} \pm \frac{9}{2} \right\rangle - 0,412 \left\vert \frac{15}{2} \pm \frac{13}{2} \right\rangle$
N_4	2	- 43	$0,675 \left\vert \frac{15}{2} \pm \frac{15}{2} \right\rangle - 0,247 \left\vert \frac{15}{2} \pm \frac{11}{2} \right\rangle - 0,241 \left\vert \frac{15}{2} \pm \frac{7}{2} \right\rangle + 0,237 \left\vert \frac{15}{2} \pm \frac{3}{2} \right\rangle + 0,202 \left\vert \frac{15}{2} \pm \frac{1}{2} \right\rangle - 0,254 \left\vert \frac{15}{2} \pm \frac{5}{2} \right\rangle - 0,201 \left\vert \frac{15}{2} \pm \frac{9}{2} \right\rangle + 0,472 \left\vert \frac{15}{2} \pm \frac{13}{2} \right\rangle$
N_5	2	18	$0,561 \left\vert \frac{15}{2} \pm \frac{15}{2} \right\rangle + 0,324 \left\vert \frac{15}{2} \pm \frac{11}{2} \right\rangle - 0,248 \left\vert \frac{15}{2} \pm \frac{7}{2} \right\rangle - 0,292 \left\vert \frac{15}{2} \pm \frac{3}{2} \right\rangle + 0,153 \left\vert \frac{15}{2} \pm \frac{1}{2} \right\rangle + 0,345 \left\vert \frac{15}{2} \pm \frac{5}{2} \right\rangle - 0,093 \left\vert \frac{15}{2} \pm \frac{9}{2} \right\rangle - 0,531 \left\vert \frac{15}{2} \pm \frac{13}{2} \right\rangle$
N_6	2	104	$0,284 \left\vert \frac{15}{2} \pm \frac{15}{2} \right\rangle + 0,513 \left\vert \frac{15}{2} \pm \frac{11}{2} \right\rangle + 0,225 \left\vert \frac{15}{2} \pm \frac{7}{2} \right\rangle - 0,259 \left\vert \frac{15}{2} \pm \frac{3}{2} \right\rangle - 0,390 \left\vert \frac{15}{2} \pm \frac{1}{2} \right\rangle - 0,023 \left\vert \frac{15}{2} \pm \frac{5}{2} \right\rangle + 0,432 \left\vert \frac{15}{2} \pm \frac{9}{2} \right\rangle + 0,446 \left\vert \frac{15}{2} \pm \frac{13}{2} \right\rangle$
N_7	2	210	$0,122 \left\vert \frac{15}{2} \pm \frac{15}{2} \right\rangle + 0,390 \left\vert \frac{15}{2} \pm \frac{11}{2} \right\rangle + 0,499 \left\vert \frac{15}{2} \pm \frac{7}{2} \right\rangle + 0,295 \left\vert \frac{15}{2} \pm \frac{3}{2} \right\rangle - 0,105 \left\vert \frac{15}{2} \pm \frac{1}{2} \right\rangle - 0,435 \left\vert \frac{15}{2} \pm \frac{5}{2} \right\rangle - 0,481 \left\vert \frac{15}{2} \pm \frac{9}{2} \right\rangle - 0,256 \left\vert \frac{15}{2} \pm \frac{13}{2} \right\rangle$
N_8	2	320	$0,040 \left\vert \frac{15}{2} \pm \frac{15}{2} \right\rangle + 0,182 \left\vert \frac{15}{2} \pm \frac{11}{2} \right\rangle + 0,368 \left\vert \frac{15}{2} \pm \frac{7}{2} \right\rangle + 0,506 \left\vert \frac{15}{2} \pm \frac{3}{2} \right\rangle + 0,537 \left\vert \frac{15}{2} \pm \frac{1}{2} \right\rangle + 0,448 \left\vert \frac{15}{2} \pm \frac{5}{2} \right\rangle + 0,275 \left\vert \frac{15}{2} \pm \frac{9}{2} \right\rangle + 0,100 \left\vert \frac{15}{2} \pm \frac{13}{2} \right\rangle$

TABLEAU II-9 A

HOLMIUM. Environnement 1
Valeur des coefficients $\mathcal{C}_\nu$.

	N_1	N_2	N_3	N_4	N_5	N_6	N_7	N_8	N_9	ν
N_1	0	0,1765	0	0	0	0	0	0	0	0
	0	0,1517	0,0217	0,2384	0	0	0	0	0	1
	0	0,1441	0,0576	0,0838	0,1572	0,2043	0	0	0	2
N_2		0,0049	0,1716	0	0	0	0	0	0	0
		0,0253	0,3684	0,0795	0,1987	0	0	0	0	1
		0,0600	0,2233	0,2048	0,2873	0,2554	0,1192	0	0	2
N_3			0,0196	0,1618	0	0	0	0	0	0
			0,0872	0,0454	0,1533	0,1476	0	0	0	1
			0,1537	0,3312	0,1650	0,0397	0,2724	0,0511	0	2
N_4				0,0441	0,1471	0	0	0	0	0
				0,1491	0,0026	0,2147	0,0939	0	0	1
				0,1367	0,0877	0,0578	0,1863	0,1935	0,0124	2
N_5					0,0784	0,1275	0	0	0	0
					0,1672	0,0201	0,2348	0,0470	0	1
					0,0257	0,1935	0,0052	0,2982	0,0743	2
N_6						0,1226	0,1030	0	0	0
						0,1161	0,1156	0,1951	0,0144	1
						0,0302	0,1174	0,1811	0,2147	2
N_7							0,1765	0,0735	0	0
							0,0253	0,2528	0,1011	1
							0,2147	0,0335	0,3756	2
N_8								0,2402	0,0392	0
								0,0253	0,3034	1
								0,1643	0,4025	2
N_9									0,3137	0
									0,4045	1
									0,2147	2

TABLEAU II-9 B

HOLMIUM. Environnement 2
Valeur des coefficients e_ν.

	N_1	N_2	N_3	N_4	N_5	N_6	N_7	N_8	N_9	N_{10}	ν
N_1	0,3064	0,0456	0,0009	0	0	0	0	0	0	0	0
	0,3690	0,2949	0,1275	0,0284	0,0015	0,0013	0,0006	0,0005	0	0	1
	0,2102	0,3406	0,3289	0,2231	0,0492	0,0626	0,0321	0,0397	0,0073	0,0004	2
	N_2	0,2256	0,0795	0,0022	0	0	0	0	0	0	0
		0,0513	0,2000	0,1820	0,0353	0,0361	0,0118	0,0108	0,0013	0	1
		0,1741	0,0997	0,1441	0,0816	0,1002	0,0718	0,1955	0,0779	0,0086	2
		N_3	0,1587	0,1089	0,0022	0,0017	0,0007	0,0003	0	0	0
			0,0652	0,0994	0,0664	0,0978	0,0685	0,0832	0,0146	0,0009	1
			0,1203	0,1188	0,0857	0,0516	0,1065	0,1382	0,2005	0,0439	2
			N_4	0,0965	0,0779	0,0569	0,0065	0,0040	0	0	0
				0,1130	0,0943	0,0189	0,0482	0,1749	0,0596	0,0049	1
				0,1133	0,1062	0,0741	0,0899	0,1453	0,1828	0,0966	2
				N_5	0	0,0238	0,0679	0,0038	0,0008	0	0
					0	0,0431	0,0790	0,0544	0,0336	0,0042	1
					0	0,0595	0,0636	0,0927	0,0672	0,0412	2
					N_6	0	0,0415	0,0521	0,0005	0	0
						0	0,0664	0,0448	0,0928	0,0106	1
						0	0,0517	0,0681	0,0789	0,1002	2
						N_7	0	0,0589	0,0007	0,0001	0
							0	0,0577	0,0703	0,0092	1
							0	0,0830	0,0736	0,0747	2
							N_8	0,1565	0,0772	0,0001	0
								0,0788	0,2188	0,0996	1
								0,1445	0,0546	0,3322	2
								N_9	0,2334	0,0403	0
									0,0361	0,2964	1
									0,1691	0,3822	2
									N_{10}	0,3124	0
										0,3977	1
										0,2138	2

TABLEAU II-9 C

ERBIUM. Environnement 1
Valeur des coefficients $\mathcal{C}_\nu$.

	N_1	N_2	N_3	N_4	N_5	N_6	N_7	N_8	ν
N_1	0,3309	0,0441	0	0	0	0	0	0	0
	0,4109	0,3287	0,1174	0,0181	0	0	0	0	1
	0,2029	0,4058	0,4058	0,2497	0,0937	0,0170	0	0	2
N_2		0,2485	0,0824	0	0	0	0	0	0
		0,0164	0,2536	0,2185	0,0578	0	0	0	1
		0,2029	0	0,1560	0,3122	0,2299	0,0681	0	2
N_3			0,1779	0,1147	0	0	0	0	0
			0,0406	0,0992	0,2508	0,1135	0	0	1
			0,2029	0,1561	0	0,1589	0,2980	0,1533	2
N_4				0,1191	0,1412	0	0	0	0
				0,1415	0,0092	0,2139	0,1746	0	1
				0,0108	0,1921	0,0978	0,0153	0,4971	2
N_5					0,0721	0,1618	0	0	1
					0,1798	0,0118	0,1364	0,2292	1
					0,0588	0,0530	0,5211	0,1441	2
N_6						0,0368	0,1765	0	0
						0,1394	0,0734	0,3230	1
						0,5304	0,0201	0,2679	2
N_7							0,0132	0,1853	0
							0,3437	0,1467	1
							0,3113	0,1212	2
N_8								0,1897	0
								0,1759	1
								0,1916	2

TABLEAU II-9 D

ERBIUM. Environnement 2
Valeur des coefficients c_ν.

	N_1	N_2	N_3	N_4	N_5	N_6	N_7	N_8	ν
N_1	0,3293	0,0453	0,0002	0,0002	0	0	0	0	0
	0,4033	0,3194	0,1133	0,0248	0,0113	0,0027	0,0002	0	1
	0,2029	0,3843	0,3498	0,1836	0,1421	0,0877	0,0229	0,0018	2
N_2		0,2402	0,0863	0,0021	0,0010	0,0001	0	0	0
		0,0320	0,2127	0,1654	0,1045	0,0367	0,0042	0,0001	1
		0,1998	0,0635	0,1536	0,1578	0,2432	0,1516	0,0212	2
N_3			0,1534	0,1221	0,0118	0,0012	0	0	0
			0,1047	0,0962	0,1686	0,1496	0,0288	0,0011	1
			0,1487	0,1398	0,2520	0,1023	0,2341	0,0849	2
N_4				0,0998	0,1443	0,0061	0,0002	0	0
				0,2167	0,1121	0,1689	0,0864	0,0046	1
				0,2690	0,0801	0,2481	0,1651	0,1357	2
N_5					0,0954	0,1200	0,0024	0	0
					0,1579	0,0945	0,1919	0,0341	1
					0,2411	0,1110	0,1520	0,2389	2
N_6						0,1578	0,0887	0,0011	0
						0,0803	0,1981	0,1443	1
						0,1283	0,1088	0,3456	2
N_7							0,2326	0,0511	0
							0,0494	0,3161	1
							0,1964	0,3441	2
N_8								0,3228	0
								0,3747	1
								0,2028	2

TABLEAU II-10 A

		N_1	N_2	N_3	N_4	N_5	N_6	N_7	N_8	N_9
N_1	ΔE	0	16	64	146	256	402	580	790	1028
	$d\sigma/d\Omega$	0,0	0,594	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
N_2	ΔE	- 16	0	48	130	240	386	564	774	1012
	$d\sigma/d\Omega$	0,961	0,022	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
N_3	ΔE	- 64	- 48	0	82	192	338	516	726	964
	$d\sigma/d\Omega$	0,0	0,904	0,069	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
N_4	ΔE	- 146	- 130	- 82	0	110	256	434	644	882
	$d\sigma/d\Omega$	0,0	0,0	0,652	0,106	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
N_5	ΔE	- 256	- 240	- 192	- 110	0	146	324	534	772
	$d\sigma/d\Omega$	0,0	0,0	0,0	0,374	0,109	0,0	0,0	0,0	0,0
N_6	ΔE	- 402	- 386	- 338	- 256	- 146	0	178	388	636
	$d\sigma/d\Omega$	0,0	0,0	0,0	0,0	0,169	0,085	0,0	0,0	0,0
N_7	ΔE	- 580	- 564	- 516	- 434	- 324	- 178	0	210	448
	$d\sigma/d\Omega$	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,060	0,052	0,0	0,0
N_8	ΔE	- 790	- 774	- 726	- 644	- 534	- 388	- 210	0	238
	$d\sigma/d\Omega$	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,016	0,026	0,0
N_9	ΔE	- 1028	- 1012	- 964	- 882	- 772	- 636	- 448	- 238	0
	$d\sigma/d\Omega$	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,003	0,011

Sections efficaces des diverses transitions dans le sesquioxyde d'Holmium pour l'environnement 1. La température est de 300°K, la longueur d'onde des neutrons incidents de 4,35 Å. L'angle de diffusion est nul. $d\sigma/d\Omega$ est exprimée en barns/stéradian, ΔE en cm^{-1}.

TABLEAU II-10-b

		N_1	N_2	N_3	N_4	N_5	N_6	N_7	N_8	N_9	N_{10}
N_1	ΔE	0	108	213	297	345,4	373	386	450	538	646
	$d\sigma/d\Omega$	1,750	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
N_2	ΔE	- 108	0	105	189	237,4	265	278	342	430	538
	$d\sigma/d\Omega$	0,281	0,768	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
N_3	ΔE	- 213	- 105	0	84	132,4	160	173	237	325	433
	$d\sigma/d\Omega$	0,004	0,293	0,323	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
N_4	ΔE	- 297	- 189	- 84	0	48,4	76	89	153	241	349
	$d\sigma/d\Omega$	0,0	0,006	0,253	0,131	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
N_5	ΔE	- 345,4	- 237,4	- 132,4	- 48,4	0	27,6	40,6	104,6	192,6	300,6
	$d\sigma/d\Omega$	0,0	0,0	0,004	0,126	0,0	0,012	0,0	0,0	0,0	0,0
N_6	ΔE	- 373	- 265	- 160	- 76	- 27,6	0	13	77	165	273
	$d\sigma/d\Omega$	0,0	0,0	0,003	0,090	0,030	0,0	0,030	0,0	0,0	0,0
N_7	ΔE	- 386	- 278	- 173	- 89	- 40,6	13	0	64	152	260
	$d\sigma/d\Omega$	0,0	0,0	0,001	0,011	0,086	0,043	0,0	0,0	0,0	0,0
N_8	ΔE	- 450	- 342	- 237	- 153	- 104,6	- 77	- 64	0	88	196
	$d\sigma/d\Omega$	0,0	0,0	0,0	0,005	0,005	0,057	0,060	0,102	0,0	0,0
N_9	ΔE	- 538	- 430	- 325	- 241	- 192,6	- 165	- 152	- 88	0	108
	$d\sigma/d\Omega$	0,0	0,0	0,0	0,0	0,001	0,0	0,001	0,056	0,099	0,0
N_{10}	ΔE	- 646	- 538	- 433	- 349	- 300,6	- 273	- 260	- 196	- 108	0
	$d\sigma/d\Omega$	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,018	0,079

Sections efficaces des diverses transitions dans le sesquioxyde d'Holmium pour l'environnement 2. La température est de 300°K, la longueur d'onde des neutrons incidents de 4,35 Å. L'angle de diffusion est nul. $d\sigma/d\Omega$ est exprimée en barns/stéradian, ΔE en cm^{-1}.

TABLEAU II-10 C

		N_1	N_2	N_3	N_4	N_5	N_6	N_7	N_8
N_1	ΔE	0	247	460	639	781	888	958	993
	$d\sigma/d\Omega$	2,571	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
N_2	ΔE	- 247	0	213	392	534	641	711	746
	$d\sigma/d\Omega$	0,217	0,587	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
N_3	ΔE	- 460	- 213	0	179	321	428	498	533
	$d\sigma/d\Omega$	0,0	0,143	0,150	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
N_4	ΔE	- 639	- 392	- 179	0	142	249	319	354
	$d\sigma/d\Omega$	0,0	0,0	0,082	0,042	0,0	0,0	0,0	0,0
N_5	ΔE	- 781	- 534	- 321	- 142	0	107	177	212
	$d\sigma/d\Omega$	0,0	0,0	0,0	0,049	0,012	0,0	0,0	0,0
N_6	ΔE	- 888	- 641	- 428	- 249	- 107	0	70	105
	$d\sigma/d\Omega$	0,0	0,0	0,0	0,0	0,031	0,004	0,0	0,0
N_7	ΔE	- 958	- 711	- 498	- 319	- 177	- 70	0	35
	$d\sigma/d\Omega$	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,022	0,001	0,001
N_8	ΔE	- 993	- 746	- 533	- 354	- 212	- 105	- 35	0
	$d\sigma/d\Omega$	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,016	0,012

Sections efficaces des diverses transitions dans le sesquioxyde d'Erbium pour l'environnement 1. La température est de 300°K, la longueur d'onde des neutrons incidents de 4,35 Å. L'angle de diffusion est nul. $d\sigma/d\Omega$ est exprimée en barns/stéradian, ΔE en cm^{-1}.

TABLEAU II-10 D

		N_1	N_2	N_3	N_4	N_5	N_6	N_7	N_8
N_1	ΔE	0	109	197	262	323	409	515	625
	$d\sigma/d\Omega$	1,420	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
N_2	ΔE	- 109	0	88	153	214	300	406	516
	$d\sigma/d\Omega$	0,209	0,597	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
N_3	ΔE	- 197	- 88	0	65	126	212	318	428
	$d\sigma/d\Omega$	0,001	0,247	0,256	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
N_4	ΔE	- 262	- 153	- 65	0	61	147	253	363
	$d\sigma/d\Omega$	0,001	0,005	0,240	0,121	0,0	0,0	0,0	0,0
N_5	ΔE	- 323	- 214	- 126	- 61	0	86	192	302
	$d\sigma/d\Omega$	0,0	0,002	0,020	0,208	0,086	0,0	0,0	0,0
N_6	ΔE	- 409	- 300	- 212	- 147	- 86	0	106	216
	$d\sigma/d\Omega$	0,0	0,0	0,001	0,007	0,124	0,094	0,0	0,0
N_7	ΔE	- 515	- 406	- 318	- 253	- 192	- 106	0	110
	$d\sigma/d\Omega$	0,0	0,0	0,0	0,0	0.002	0,058	0,083	0,0
N_8	ΔE	- 625	- 516	- 428	- 363	- 302	- 216	- 110	0
	$d\sigma/d\Omega$	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,020	0,068

Sections efficaces des diverses transitions dans le sesquioxyde d'Erbium pour l'environnement 2. La température est de 300°K, la longueur d'onde des neutrons incidents de 4,35 Å. L'angle de diffusion est nul. $d\sigma/d\Omega$ est exprimée en barns/stéradian, ΔE en cm^{-1}.

CHAPITRE III

ÉTUDE DES IONS DU GROUPE DE FER

Résumé :

Dans ce chapitre est étudiée la diffusion des neutrons par les ions du groupe du fer en présence de l'action d'un champ cristallin. La situation est inverse de celle rencontrée pour les terres rares. Les effets du champ cristallin sont grands devant ceux de l'interaction spin-orbite. Le multiplet L S du couplage Russel-Saunders et de la règle de Hund est scindé en un ensemble de multiplets orbitaux associés aux représentations irréductibles du groupe dont les opérations laissent invariant le champ cristallin. En général la composante "cubique" de ce champ est prépondérante. Elle conduit à des séparations de niveaux de l'ordre de 10000 cm^{-1}. Les déviations à cette symétrie et l'interaction spin-orbite apparaissent comme des perturbations qui lèvent la dégénérescence du niveau orbital "cubique" fondamental. Les distances de ces sous-niveaux sont de l'ordre de la centaine en cm^{-1}. On peut espérer, par diffusion inélastique des neutrons lents, observer des transitions entre de tels niveaux. Le calcul de la section efficace fait appel, dans le cas le plus général, à la formule générale (1-6) ou, dans les cas favorables, aux formules simplifiées (1-79). Nous envisageons le cas plus particulier du chlorure ferreux $FeCl_2$ qui semble un des corps où la détermination expérimentale est la plus aisée.

I - CONSIDERATIONS GENERALES SUR LES IONS DU GROUPE DU FER -

Les idées que nous allons brièvement développer ici ne sont pas originales. On les trouvera exposées plus en détail dans le cours de A. Abragam [17]. C'est d'ailleurs le professeur Abragam qui nous a suggéré d'appliquer le calcul du chapitre I aux ions du groupe du fer.

La caractéristique essentielle des ions de ce groupe est la présence d'une couche incomplète 3d pour laquelle l = 2. Nous allons supposer que la règle de Hund est applicable dans le cas que nous envisageons. Le raisonnement déjà appliqué aux terres rares (Cf. Ch. II §1) nous permet de déduire les termes spectroscopiques des différents ions. Nous les avons reportés dans le tableau III-1. Les constantes d'interaction spin-orbite sont en général faibles. Elles ont été déterminées par des mesures spectroscopiques, nous en avons reporté la valeur dans le tableau III-1. Pour des raisons d'exposition nous allons supposer que l'ion paramagnétique M se trouve entouré de six molécules identiques. Le complexe paramagnétique ainsi formé est disposé sur un octaèdre plus ou moins déformé dont l'ion M occupe le centre, les molécules X occupant les sommets. Les distances MX sont de l'ordre de 2 à 3 Å, selon la nature de l'ion ou de la molécule X. En première approximation les six molécules X seront assimilées à des charges ponctuelles négatives placées au sommet d'un octaèdre régulier. Le champ cristallin résultant est alors de symétrie cubique et généralement, dans le groupe du fer, son intensité est très supérieure à la constante λ de l'interaction spin-orbite, sans toutefois être suffisante pour rompre le couplage Russel-Saunders et violer la règle de Hund. Dans le développement du potentiel en puissances successives de x_n, y_n, z_n, apparaîtra donc le terme :

$$V_{cr}^{(4)} = D_4^\circ \sum_n \left(x_n^4 + y_n^4 + z_n^4 - \frac{3}{5} r_n^4 \right) \qquad (3\text{-}1)$$

où D_4° est une constante négative qui dépend de l'entourage considéré et de la distance entre les ions. Les termes d'ordre supérieurs à 4 ne doivent pas être retenus puisque l = 2. (Cf. Appendice II).

Si l'octaèdre n'est pas parfaitement régulier d'autres termes apparaîtront dans le développement du potentiel, mais leurs coefficients sont en général petits devant D_4° ; nous les considérerons comme des perturbations et nous les envisagerons ultérieurement.

Fonctions d'onde et niveaux d'énergie des ions du groupe du fer dans un site octaédrique.

Dans la multiplicité LS du groupe du fer, le potentiel $V_{cr}^{(4)}$ peut être écrit :

$$V_{cr}^{(4)} \simeq \sum_n \left(x_n^4 + y_n^4 + z_n^4 - \frac{3}{5} r_n^4 \right) = \beta \left[L_x^4 + L_y^4 + L_z^4 - \frac{3}{5} L^2 (L+1)^2 + \frac{1}{5} L(L+1) \right] \qquad (3\text{-}2)$$

β est l'équivalent de l'élément de matrice réduit. Nous en avons reporté les valeurs dans le tableau III-1. Dans le chapitre II nous avons calculé les éléments de matrice de V_{cr} dans une multiplicité J. Il suffira d'utiliser les formules (2-29) en remplaçant J par L pour obtenir ceux dont nous avons besoin ici. La résolution de l'équation séculaire :

$$\det | < LL_z | V_{cr}^{(4)} | LL'_z > - E < LL_z | LL'_z > | = 0 \qquad (3-3)$$

fournira la succession des niveaux résultant de la décomposition du niveau L. Il est bien entendu possible de prévoir les niveaux qui apparaîtront en considérant la décomposition de la représentation D^L du groupe des rotations en les représentations irréductibles du groupe du cube O. En général le calcul mène à une distance de l'ordre de 10000 cm^{-1} pour les divers sous-niveaux issus de la décomposition de D^L. Nous n'avons en conséquence reporté que les niveaux fondamentaux et les fonctions d'onde correspontantes (tableau III-1).

Le tableau ainsi complété appelle quelques commentaires.

-1) Au stade où nous en sommes, l'interaction spin-orbite n'a pas été introduite et la dégénérescence de spin (2S + 1) n'a pas été levée. Nous pouvons cependant affirmer que pour les multiplets orbitaux Γ_1, Γ_2, Γ_3, l'interaction spin-orbite sera, au premier ordre, sans influence. En effet pour de tels niveaux les éléments de matrice des composantes de $\vec{L}$ sont nuls. Le moment orbital est bloqué.

2) Trois cas se présentent (pour les niveaux autres que Γ_1 , Γ_2 , Γ_3).

a) L'interaction spin-orbite est très supérieure à l'action des composantes de symétrie inférieure du champ cristallin qui peut être négligée.

Le niveau Γ_1 sera scindé. On obtiendra à l'avance sa décomposition en réduisant la représentation $D^S \otimes \Gamma_1$ en représentations irréductibles du groupe du cube, simple ou double suivant que S est entier ou demi entier (1).

b) L'interaction spin-orbite est de l'ordre de grandeur de l'action des composantes de symétrie inférieure du champ cristallin. On doit tenir compte simultanément des deux effets. Soit $\mathcal{G}$ le groupe correspondant à la composante considérée. Le niveau Γ_1 sera scindé en sous-niveaux qui correspondent à la réduction de la représentation $D^S \otimes \Gamma_1$ en représentations irréductibles du groupe $\mathcal{G}$ ou de son groupe double $\mathcal{G}^*$ suivant que S est entier ou demi-entier.

c) L'interaction spin-orbite est très inférieure à l'action des composantes de symétrie inférieure du champ cristallin et peut être négligée. Le multiplet Γ_1 sera scindé. On obtiendra sa décomposition en réduisant la représentation Γ_1 en représentations irréductibles du groupe $\mathcal{G}$.

Le cas du multiplet Γ_3 peut être rattaché à cette catégorie. L'interaction spin-orbite n'y contribue pas au premier ordre. La dégénérescence d'ordre 2 de Γ_3 peut cependant être levée par l'action d'une composante du symétrie inférieure du champ (2).

3) Les interactions en présence pourront donc, dans certains cas favorables, lever la dégénérescence du niveau orbital fondamental avec ou sans action sur la dégénérescence de spin. Les distances entre les sous-niveaux obtenus sont assez souvent de l'ordre de la centaine de cm^{-1}. On peut donc espérer observer des transitions entre ceux-ci par la diffusion inélastique des neutrons lents, à condition que les sections efficaces soient d'un ordre de grandeur convenable.

Dans le cas le plus général des décompositions que l'on obtient, les fonctions de base des états pourront être écrites sous la forme :

$$\Psi = \sum_{J,M} A_{J,M} | JM >$$

où

$$| L - S | < J < L + S$$

C'est la formule (1-1 b). Le calcul de la section efficace de diffusion pour de tels états a été établie au chapitre I ; c'est la formule (1-68). Comme nous l'avons expliqué à la fin de ce chapitre, il est nécessaire de l'utiliser pour obtenir la bonne valeur du facteur de forme. Si les valeurs des vecteurs de diffusion sont telles que les facteurs de forme correspondant aux valeurs de $\nu > 0$ soient négligeables, on pourra utiliser la forme simplifiée (1-79) à condition d'écrire les fonctions d'onde sous la forme (1-1 a) :

$$\Psi = \sum_{L_z, S_z} A_{L_z S_z} | LL_z > | SS_z >$$

---

(1) $D^S \otimes \Gamma_1$ est le produit Kroneckerien de D_S par Γ_1 : $(D^S \otimes \Gamma_1)_{ij,kl} = (D^S)_{ik} (\Gamma_1)_{jl}$. On trouvera un exposé de ses propriétés dans le livre de D. Saint-James [14] et dans le cours de A. Abragam [17].

(2) Ceci n'implique pas que λ soit nul mais signifie que les éléments de matrice des composantes de $\vec{L}$ sont nuls dans le multiplet Γ_3. Il existe, bien entendu, des éléments de matrice non nuls entre multiplets orbitaux successifs. Au second ordre l'interaction spin-orbite introduira donc des perturbations qui seront de l'ordre de λ/Δ où Δ est la distance des niveaux orbitaux.

II - CALCUL DES COEFFICIENTS DE LA FORMULE (1-68) DANS LE CAS DU GROUPE DU FER -

Les valeurs de S et L qui interviennent dans les termes spectroscopiques du groupe du fer sont suffisamment peu nombreuses pour qu'on puisse donner le tableau complet des coefficients $\langle J \| \mathcal{G} \| J' \rangle$ nécessaires pour le calcul des sections efficaces magnétiques. Ces divers coefficients, dont la forme explicite est donnée par les formules (1-55) et (1-57) reportées dans le tableau I-1 ont été déterminés à l'aide du programme de calcul des coefficients 9J, 6J, 3J écrit pour le calculateur électronique Ferranti de Saclay. Leurs valeurs sont reportées dans le tableau III-2.

III - APPLICATION AU CAS DU CHLORURE FERREUX ANHYDRE : L = 2, S = 2 -

Pendant l'exécution de ce travail notre attention a été attirée sur une publication de J. Kanamori [18] qui étudiait le chlorure ferreux anhydre. Kanamori cherche à expliquer la variation avec la température de la susceptibilité magnétique. Le triplet doit être scindé en un singulet et un doublet par suite de l'existence d'une composante rhomboédrique du champ cristallin ; le doublet doit être le niveau fondamental pour que les variations de susceptibilité puissent être expliquées. Par souci de simplification, Kanamori suppose qu'il est assez éloigné du singulet (1000 cm^{-1}). L'interaction spin orbite lève la dégénérescence totale du doublet (d = 10) qui laisse la place à cinq doublets équidistants.

La valeur de la constante de couplage conduit à une distance $\Delta \simeq 100\ cm^{-1}$. Le schéma de Kanamori est représenté sur la figure III-1.

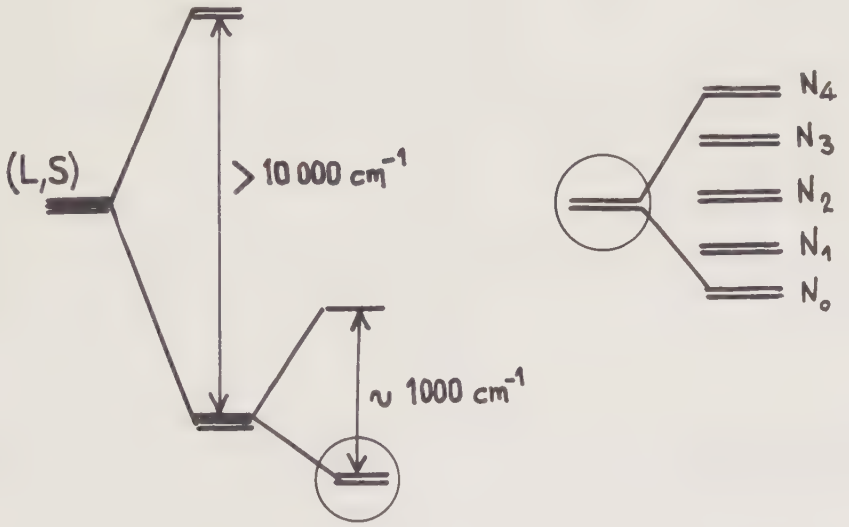


Figure III-1 - Schéma de Kanamori.

Si le schéma de Kanamori est exact on peut espérer par diffusion des neutrons mesurer la distance Δ et en déduire la valeur de la constante de couplage λ, ce qui explique l'intérêt porté à ce corps.

Nous avons donc commencé par réexaminer le schéma donné par Kanamori. Le chlorure ferreux cristallise dans le système hexagonal ; le groupe d'espace est D^5_{3d}. Sur la figure III-2 nous avons représenté l'environnement d'un atome de fer. Les premiers voisins sont placés au sommet d'un octaèdre irrégulier. L'atome de fer est à l'origine des coordonnées. Trois des atomes de chlore sont situés aux sommets d'un triangle équilatéral de côté a = 3,58 Å. Le plan de ce triangle est à la côte c/12. L'axe des z est l'axe ternaire qui passe par O et est perpendiculaire au plan du triangle. Les trois autres atomes de chlore sont placés aux sommets d'un triangle équilatéral déduit du précédent par une rotation de $2\pi/3$ autour de Oz et une translation de -C/6 parallèlement à cet axe.

Le paramètre c vaut 17,54 Å. Les seconds voisins au nombre de deux sont placés aux cotes C/4.

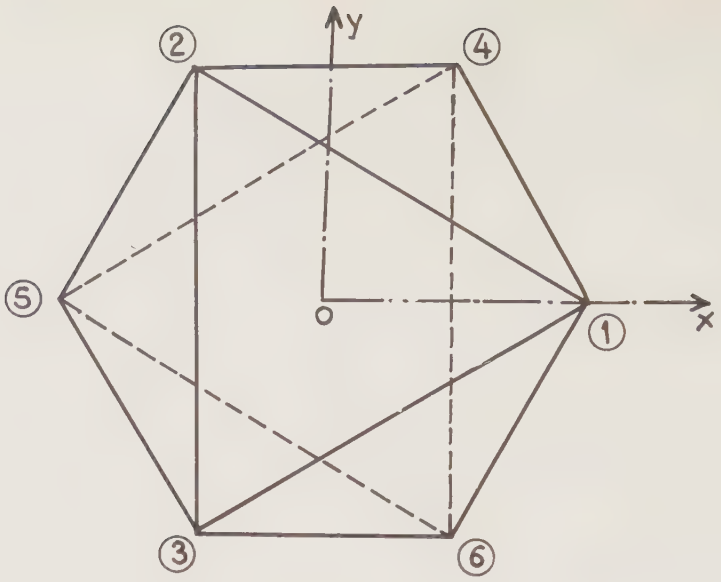


Figure III-2 - Entourage de l'ion Fe^{++}.

Si l'on tient compte des seuls premiers voisins nous pouvons calculer l'effet du champ cristallin sur le niveau L de l'ion Fe^{++}.

Nous trouvons alors une répartition en deux doublets et un singulet orbitaux.

Le singulet est compris entre les deux doublets (1).

Pour faire le calcul nous avons dû choisir des valeurs pour les quantités $< r^2 >$ et $< r^4 >$ moyen. Nous avons choisi celles données par R.E. Watson [19], c'est-à-dire :

$$< r^2 > = 0,39 \text{ Å}^2$$

$$< r^4 > = 0,35 \text{ Å}^4$$

Il est remarquable que la valeur de $< r^4 >$ soit beaucoup plus faible que celle que l'on obtient en utilisant les approximations d'Hartree ou d'Hartree-Fock.

Avec les valeurs choisies on trouve une distance de l'ordre de 30000 cm^{-1} entre les deux doublets et une distance de l'ordre de 500 cm^{-1} entre le doublet fondamental et le singulet. Cette dernière distance est sans doute assez faible, elle est liée à la faible valeur de $< r^4 >$.

On voit donc qu'en première approximation nous pourrons adopter l'hypothèse de Kanamori qui a au moins le mérite d'une grande simplicité. En effet les fonctions d'onde du doublet orbital peuvent être écrites :

$$\begin{aligned} \Phi_1 &= \cos\alpha \,|\, 2\text{-}2 > + \sin\alpha \,|\, 2\ 1 > \\ \Phi_2 &= \cos\alpha \,|\, 2\ 2 > - \sin\alpha \,|\, 2\text{-}1 > \end{aligned} \qquad (3\text{-}4)$$

l'axe des z étant bien entendu l'axe ternaire.

Si la composante du champ rhomboédrique est très petite devant la composante cubique (c'est le cas ici) on pourra choisir :

$$\cos\alpha = \sqrt{\frac{2}{3}}.$$

---

(1) Voir figure III-1.

Quoiqu'il en soit les cinq doublets ont respectivement comme fonctions d'onde :

$$
\begin{aligned}
N_0 &\begin{cases} \Phi_1 | S\ 2 > \\ \Phi_2 | S\text{-}2 > \end{cases} \\
N_1 &\begin{cases} \Phi_1 | S\ 1 > \\ \Phi_2 | S\text{-}1 > \end{cases} \\
N_3 &\begin{cases} \Phi_1 | S\ 0 > \\ \Phi_2 | S\ 0 > \end{cases} \\
N_4 &\begin{cases} \Phi_1 | S\text{-}1 > \\ \Phi_2 | S\ 1 > \end{cases} \\
N_5 &\begin{cases} \Phi_1 | S\text{-}2 > \\ \Phi_2 | S\ 2 > \end{cases}
\end{aligned}
\qquad (3\text{-}5)
$$

Les niveaux sont rangés par ordre d'énergie croissante. Dans le tableau III-3 nous avons récrit ces fonctions sous la forme (1-1 a) en supposant que $\cos \alpha = \sqrt{2/3}$. Ce sont ces fonctions qui doivent être utilisées pour le calcul général de la section efficace.

Pendant que nous poursuivions ce travail est paru un article dû à Y. Yamada [20] qui tentait le calcul des sections efficaces dans le même corps. Malheureusement la formule utilisée par cet auteur est inexacte. Yamada prétend en effet que la section efficace de diffusion comprend deux contributions indépendantes et sans cohérence entre elles :

a) la contribution due au spin seul,

b) la contribution due au moment orbital seul.

Cette conclusion est en désaccord avec la formule de Schwinger (Cf. formule (1-80)). En effet à l'approximation d'ordre zéro la conclusion d'Yamada revient à écrire :

$$| \vec{L} + 2\vec{S} |^2 = L(L+1) + 4S(S+1)$$

négligeant ainsi le terme rectangle [1].

a) Calcul des termes radiaux.

Dans les divers coefficients $\mathcal{A}$, $\mathcal{B}$ et $\mathcal{C}$ définis par les équations (1-62) à (1-64) apparaissent les "facteurs de forme" $F^L_{2\nu}$ et $F^S_{2\nu}$. Les expressions de ceux-ci sont données par les équations (1-20).

Il nous faut, pour les calculer, choisir les fonctions radiales à un électron $\Phi_i(r)$ relatives à la couche 3d. Nous avons choisi les plus récentes qui ont été fournies par Watson [19]. Elles se présentent sous la forme d'une combinaison linéaire de quatre fonctions hydrogénoïdes de la couche 3d :

$$\Phi_i(r) = \sum_{i=1}^{4} c_i\, r^2\, e^{-r/a_i}$$

Les constantes c_i et a_i, différentes pour chaque ion, ont été déterminées par Watson à l'aide d'une méthode "self-consistente".

Nous donnons les valeurs de ces coefficients pour l'ion Fe^{++}.

i	c_i	$1/a_i$	(a_i en unités atomiques).
1	2,5983	2,1208	
2	33,8626	4,1580	
3	83,9476	7,8223	
4	23,3674	13,9775	

(1) L'erreur d'Yamada repose sur une mauvaise interprétation de la réalité d'une intégrale.

Les intégrations (1-20) peuvent être effectuées algorithmiquement et nous aurons à calculer les six quantités :

$$F_o^S = \frac{6!}{k^7} \sum_{jj'} C_j C_{j'} \frac{\xi_{jj'}^7}{(1+\xi_{jj'}^2)^6} \left(1 - \frac{10}{3}\xi_{jj'}^2 + \xi_{jj'}^4\right)$$

$$F_2^S = \frac{16 \times 4!}{k^7} \sum_{jj'} C_j C_{j'} \frac{\xi_{jj'}^7}{(1+\xi_{jj'}^2)^6} \left(7\xi_{jj'}^2 - 3\xi_{jj'}^4\right)$$

$$F_4^S = \frac{32 \times 5!}{k^7} \sum_{jj'} C_j C_{j'} \frac{\xi_{jj'}^7}{(1+\xi_{jj'}^2)^6} \xi_{jj'}^4 \qquad (3\text{-}6)$$

$$F_o^L = \frac{2 \times 5!}{k^7} \sum_{jj'} C_j C_j \frac{\xi_{jj'}^7}{(1+\xi_{jj'}^2)^5} \left(3 + \xi_{jj'}^2 + 2\xi_{jj'}^4 + \xi_{jj'}^6 + \frac{1}{5}\xi_{jj'}^8\right)$$

$$F_2^L = \frac{4.4!}{k^7} \sum_{jj'} C_j C_{j'} \frac{\xi_{jj'}^7}{(1+\xi_{jj'}^2)^5} \left(14\xi_{jj'}^2 + 10\xi_{jj'}^4 + 5\xi_{jj'}^6 + \xi_{jj'}^8\right)$$

$$F_4^L = \frac{128}{k^7} \sum_{jj'} C_j C_{j'} \frac{\xi_{jj'}^7}{(1+\xi_{jj'}^2)^5} \left(10\xi_{jj'}^4 + 5\xi_{jj'}^6 + \xi_{jj'}^8\right)$$

on a posé :

$$\xi_{jj'} = \frac{1}{k}\left(\frac{1}{a_j} + \frac{1}{a_{j'}}\right)$$

Nous avons représenté sur la figure III-3 la variation de ces fonctions avec le paramètre k^2. On remarque que, comme il fallait s'y attendre, F_o^L et F_o^S sont égales à 1 pour $k = 0$, les autres fonctions étant nulles. On remarquera également que pour des vecteurs de diffusion dont la longueur est inférieure à 2Å^{-1}, on peut encore négliger les termes pour lesquels $\nu > 0$ et se borner à la formulation simplifiée. (1-79) (1).

b) Calcul des sections efficaces.

α) Approximation d'ordre zéro.

Comme pour des valeurs assez grandes du vecteur de diffusion nous pouvons négliger les termes correspondant à $\nu > 0$, nous pouvons utiliser la formule simplifiée valable pour une poudre (1-79). Le calcul des diverses constantes est aisé. On trouve :

$A_o^+ = -4$ et $B_{o,1}^+ = -2\sqrt{5}$. La section efficace devient donc :

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{20}{3}\left(\frac{M_N e g_N}{2mc}\right)^2 \frac{p_f}{p_o} \frac{e^{-E_o/k_BT}}{\sum_j e^{-E_j/k_BT}} \sum_{r=-1}^{1} \Bigg\{ \Big| 2F_o^S(k) \sum_{\substack{S_z L_z \\ S'_z L'_z}} A_{S_z L_z}^{f*} A_{S'_z L'_z}^{o} (-)^{S-S'_z} < SS_z S - S'_z | 1 - r > \delta_{L_z L'_z} + F_o^L(k) \sum_{\substack{S_z L_z \\ S'_z L'_z}} A_{S_z L_z}^{f*} A_{S'_z L'_z}^{o} (-)^{L-L'_z} < LL_z L - L'_z | 1\ r > \delta_{S_z S'_z} \Big|^2 \Bigg\} \qquad (3\text{-}7)$$

Cette forme simple résulte du fait que $S = L = 2$. Les coefficients $A_{S_z L_z}$ sont donnés par la formule (3-5).

Le calcul de la section efficace est alors très aisé. On remarque que :

a) pour la transition élastique l'opérateur orbital et l'opérateur de spin interviennent simultanément.

b) pour les transitions inélastiques entre deux niveaux successifs seul intervient l'opérateur de spin.

c) pour les autres transitions ou seul l'élément orbital peut intervenir la section efficace est en définitive nulle.

---

(1) Ne pas oublier que $k = 2\pi\left(\frac{1}{\lambda_f} - \frac{1}{\lambda_o}\right)$. Si λ_o est infini, la valeur mentionnée correspond à une transition de 100 cm^{-1} environ.

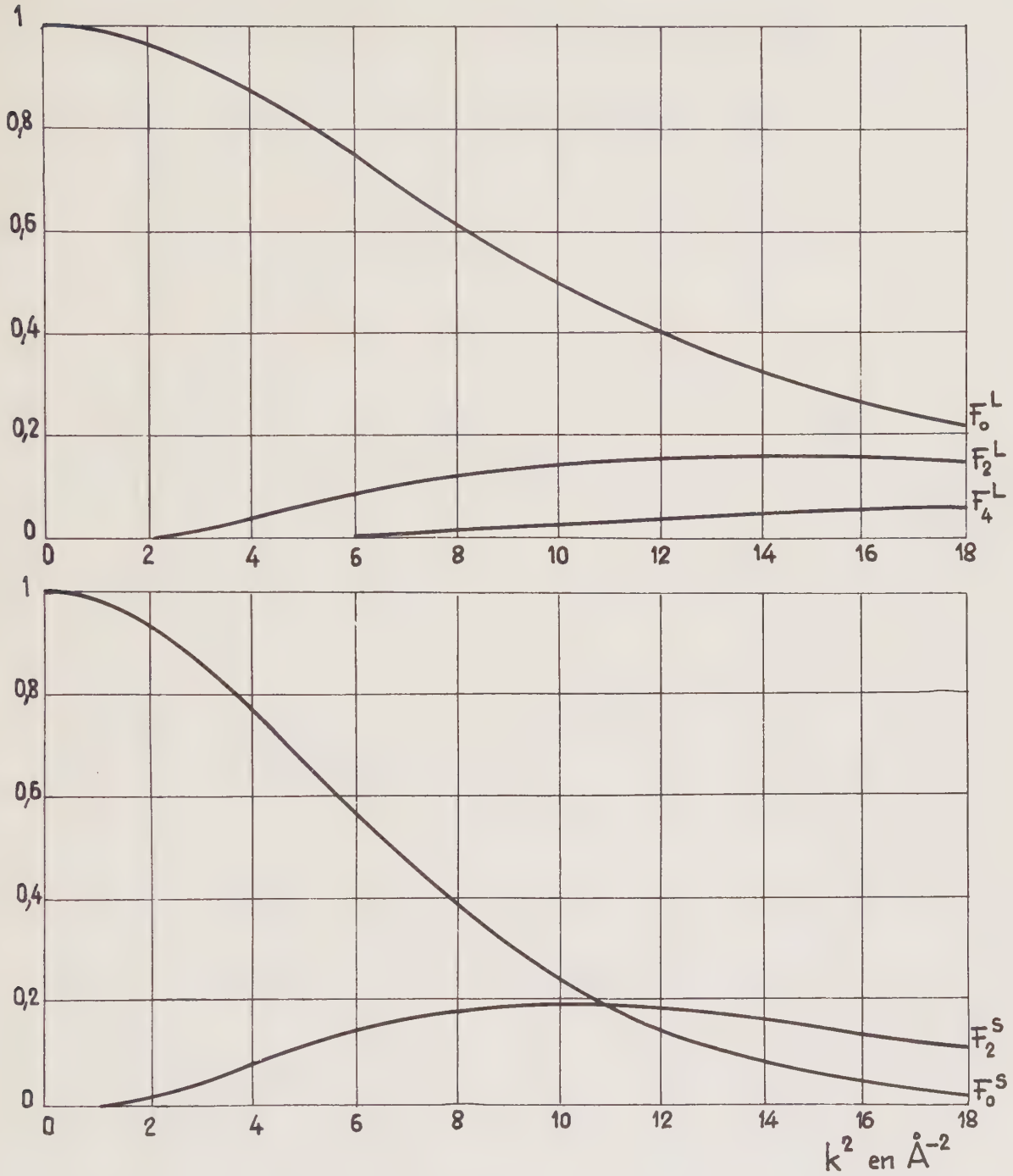


Figure III-3 - Variation des facteurs de forme.

Ce dernier résultat est retrouvé facilement à partir de la formule de Schwinger.

Ainsi, au premier ordre, seules existent les transitions inélastiques dues au spin seul. Dans le tableau III-4 nous donnons l'expression des sections efficaces pour chacune des transitions permises au premier ordre.

La section efficace hypoélastique (perte d'énergie des neutrons) s'écrit donc à cet ordre d'approximation :

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_a = \frac{16}{3}\left(\frac{M_N e g_N}{2mc}\right)^2 \frac{p_f}{p_o} \frac{1 + 1,5x + 1,5x^2 + x^3}{1 + x + x^2 + x^3 + x^4} (F_o^S(k))^2 \qquad (3-8)$$

La section efficace hyperélastique étant :

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_d = \frac{16}{3}\left(\frac{M_N e g_N}{2mc}\right)^2 \frac{p_f}{p_o} \frac{x(1 + 1,5x + 1,5x^2 + x^3)}{1 + x + x^2 + x^3 + x^4} (F_o^S(k))^2 \qquad (3-9)$$

on a posé :

$$x = e^{-\Delta/kT}$$

β) Section efficace générale.

Pour les transitions entre deux états successifs séparés par une distance $\Delta \simeq 100\ cm^{-1}$, l'approximation d'ordre zéro est suffisante. Il n'en va plus de même pour les transitions 2Δ, 3Δ, et 4Δ. A l'ordre zéro nous avons vu que leur section efficace est nulle, il n'en n'est plus de même aux autres ordres. Nous avons utilisé, pour le calculer, la formule générale (1-68). Nous avons écrit, à cette intention, un programme pour le calculateur électronique Ferranti utilisant les valeurs du tableau III-2 d et les fonctions d'onde sous la forme 1-1 a [1]. Le calcul a été mené pour $\Delta = 100\ cm^{-1}$ et pour une diffusion en avant.

Nous avons pu constater que nous retrouvions les valeurs des sections efficaces déjà calculées avec des corrections de l'ordre du pour-cent. Les sections efficaces correspondant aux transitions 2Δ, 3Δ et 4Δ ont une section efficace inférieure à 0,001 barn/stéradian.

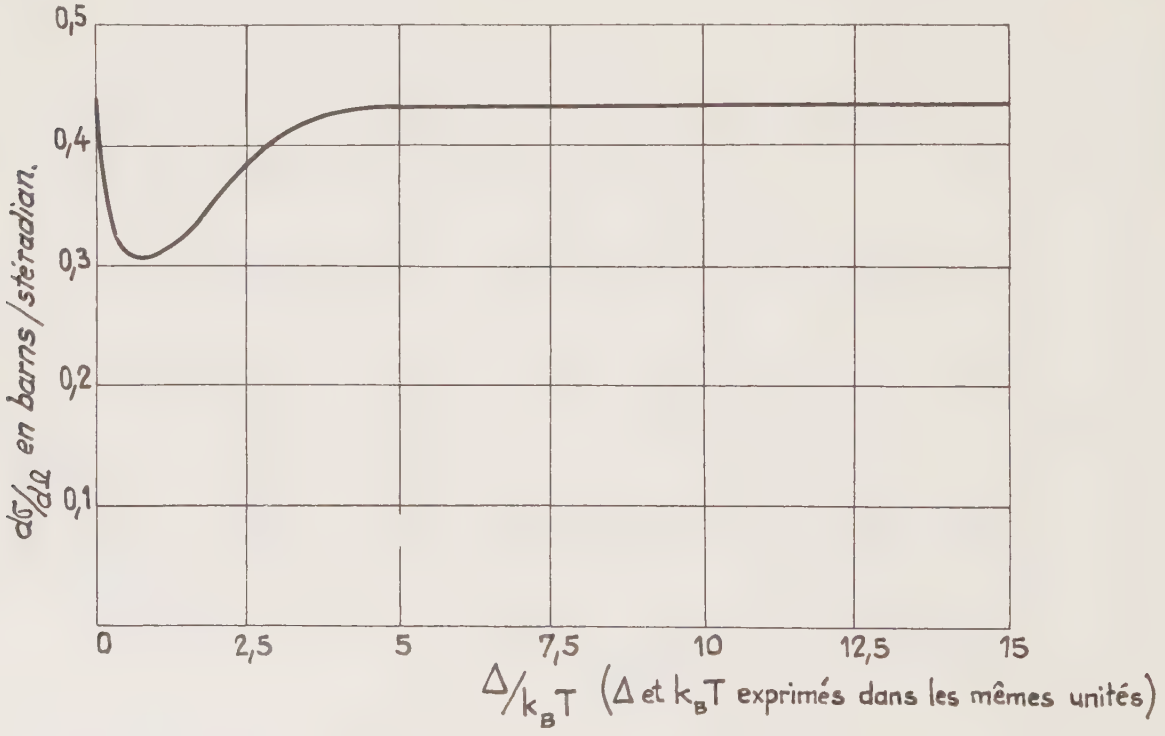
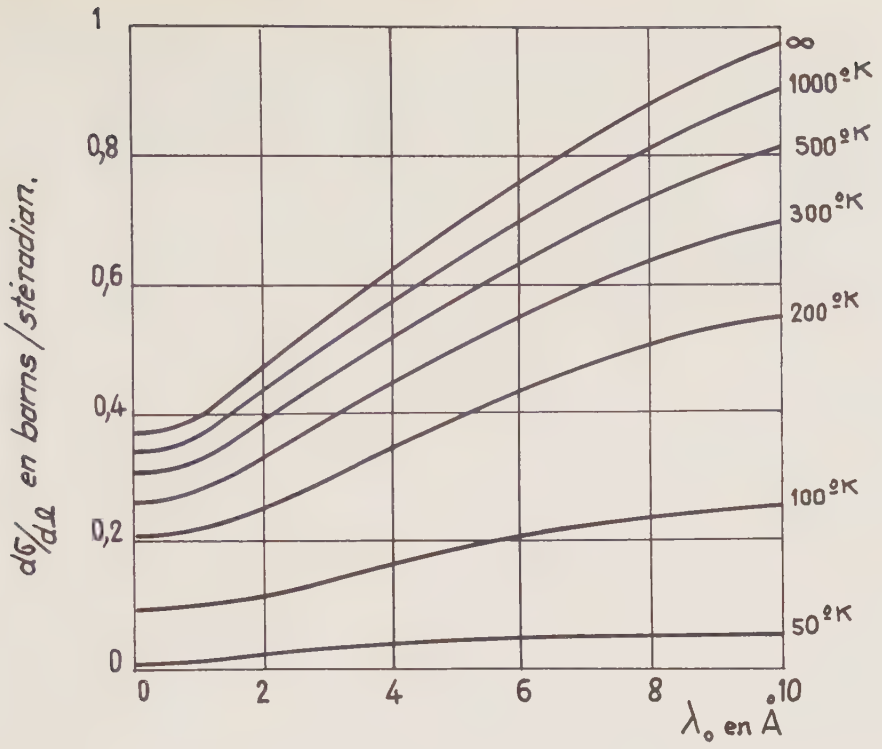
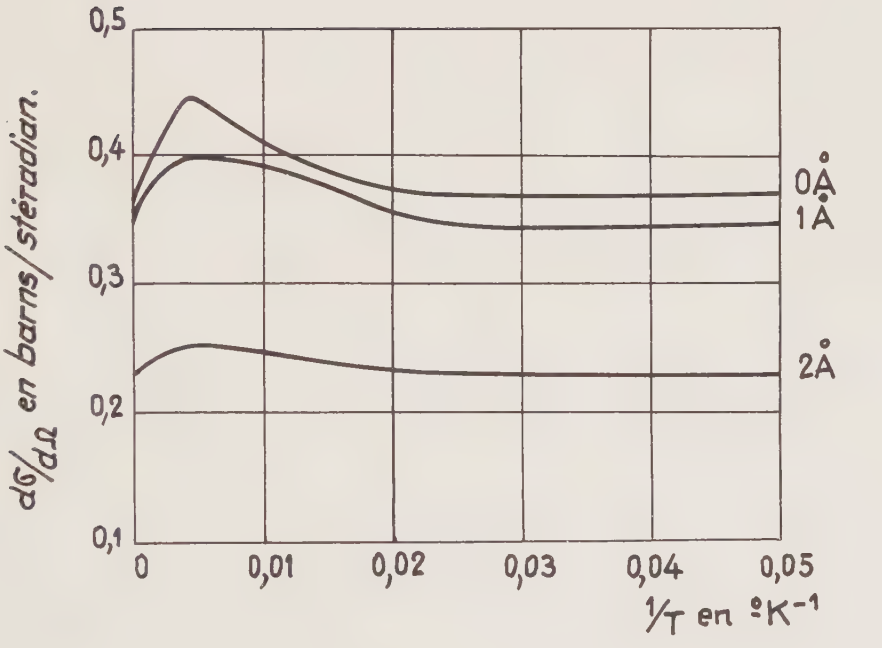


Figure III-4 (a) - Section efficace élastique.

(1) Nous avons bien entendu écrit un programme suffisamment général pour pouvoir être utilisé dans d'autres cas que celui du chlorure ferreux.



1



2

Figure III-4 (b)

1-Section efficace hyperélastique.

2-Section efficace hypoélastique.

γ) Conclusions.

Les sections efficaces que nous avons calculées sont d'un ordre de grandeur suffisant pour que l'on puisse espérer observer expérimentalement la transition Δ. On peut donc envisager avec confiance une détermination expérimentale de la constante λ. Dans une telle détection il faudra utiliser un chlorure ferreux particulièrement bien déshydraté pour éviter les diffusions parasites. Sur les figures III-4 nous avons représenté la variation des diverses sections efficaces en fonction des divers paramètres.

Note : Une étude expérimentale du chlorure ferreux a été réalisée à Saclay par : S. Hautecler, J. Konstantinović, D. Cribier et B. Jacrot. C.R. Acad. Sci, 254, 1026 (1962). Les résultats sont en bon accord avec le modèle théorique.

TABLEAU III-1

Ion		Terme	λ cm^{-1}	β	Niveau	Fonctions d'onde
Ti^{+++}	$3d^1$	^2D	154	$\frac{2}{63}$	Γ_5	$\frac{1}{\sqrt{2}}[\|2\ 2\rangle - \|2\ -2\rangle]$ $\|2\ 1\rangle$ $\|2\ -1\rangle$
V^{+++}	$3d^2$	^3F	104	$-\frac{2}{315}$	Γ_4	$\|3\ 0\rangle$ $\frac{1}{\sqrt{2}}\left[\sqrt{\frac{3}{8}}(\|3\ 1\rangle + \|3\ -1\rangle) + \sqrt{\frac{5}{8}}(\|3\ 3\rangle + \|3\ -3\rangle)\right]$ $\frac{1}{\sqrt{2}}\left[\sqrt{\frac{3}{8}}(\|3\ 1\rangle - \|3\ -1\rangle) - \sqrt{\frac{5}{8}}(\|3\ 3\rangle - \|3\ -3\rangle)\right]$
Cr^{+++} V^{++}	$3d^3$	^4F	87 55	$\frac{2}{315}$	Γ_2	$\frac{1}{\sqrt{2}}[\|3\ 2\rangle - \|3\ -2\rangle]$
Mn^{+++} Cr^{++}	$3d^4$	^5D	57 85	$-\frac{2}{63}$	Γ_3	$\|2\ 0\rangle$ $\frac{1}{\sqrt{2}}[\|2\ 2\rangle + \|2\ -2\rangle]$
Fe^{+++} Mn^{++}	$3d^5$	^6S	0		Γ_1	
Fe^{++}	$3d^6$	^5D	-100	$\frac{2}{63}$	Γ_5	$\frac{1}{\sqrt{2}}[\|2\ 2\rangle - \|2\ -2\rangle]$ $\|2\ 1\rangle$ $\|2\ -1\rangle$
Co^{++}	$3d^7$	^4F	-180	$-\frac{2}{315}$	Γ_4	$\|3\ 0\rangle$ $\frac{1}{\sqrt{2}}\left[\sqrt{\frac{3}{8}}(\|3\ 1\rangle + \|3\ -1\rangle) + \sqrt{\frac{5}{8}}(\|3\ 3\rangle + \|3\ -3\rangle)\right]$ $\frac{1}{\sqrt{2}}\left[\sqrt{\frac{3}{8}}(\|3\ 1\rangle - \|3\ -1\rangle) - \sqrt{\frac{5}{8}}(\|3\ 3\rangle - \|3\ -3\rangle)\right]$
Ni^{++}	$3d^8$	^3F	-355	$\frac{2}{315}$	Γ_2	$\frac{1}{\sqrt{2}}[\|3\ 2\rangle - \|3\ -2\rangle]$
Co^{++}	$3d^9$	^2D	-852	$-\frac{2}{63}$	Γ_3	$\|2\ 0\rangle$ $\frac{1}{\sqrt{2}}[\|2\ 2\rangle + \|2\ -2\rangle]$

TABLEAU III-2

J'	J	$\mathcal{G}^{L}_{0,1}$	$\mathcal{G}^{L}_{2,1}$	$\mathcal{G}^{L}_{2,3}$	$\mathcal{G}^{L}_{4,3}$	$\mathcal{G}^{L}_{4,5}$
3/2	3/2	3,7947	1,8974	-1,7705	-1,3279	0
3/2	5/2	-1.2649	-0,6325	2,1684	1,6263	0
5/2	3/2	1,2649	0,6325	-2,1684	-1,6263	0
5/2	5/2	-4,7329	-2,3664	2,6558	1,9918	0

J'	J	$\mathcal{G}^{S}_{0,1}$	$\mathcal{G}^{S}_{2,1}$	$\mathcal{G}^{S}_{2,2}$	$\mathcal{G}^{S}_{2,3}$	$\mathcal{G}^{S}_{4,3}$	$\mathcal{G}^{S}_{4,4}$	$\mathcal{G}^{S}_{4,5}$
3/2	3/2	-1,2649	-1,2649	0	0,4426	2,6558	0	0
3/2	5/2	2,5298	-0,6324	-2,6726	-1,4456	0,8132	0,3586	0
5/2	3/2	-2,5298	0,6324	-2,6726	1,4456	-0,8132	0,3586	0
5/2	5/2	2,3664	0,6761	0	2,6558	-0,4426	0	-0,4140

a) Valeur des divers coefficients pour le terme ^{2}D.

J'	J	$\mathcal{G}^{L}_{0,1}$	$\mathcal{G}^{L}_{2,1}$	$\mathcal{G}^{L}_{2,3}$	$\mathcal{G}^{L}_{4,3}$	$\mathcal{G}^{L}_{4,5}$
2	2	5,9628	2,5298	1,3414	1,0060	0
2	3	-2,1082	-1,0541	-1,4988	-1,0866	0
2	4	0	0	0,5476	0,4107	0
3	2	2,1082	1,0541	1,4988	1,0866	0
3	3	6,8599	3,4298	1,2122	0,9091	0
3	4	-2,1213	-1,0606	-1,5196	-1,1397	0
4	2	0	0	0,5476	0,4107	0
4	3	2,1213	1,0606	1,5196	1,1397	0
4	4	8,2159	4,1034	2,2244	1,6683	0

J'	J	$\mathcal{G}^{S}_{0,1}$	$\mathcal{G}^{S}_{2,1}$	$\mathcal{G}^{S}_{2,2}$	$\mathcal{G}^{S}_{2,3}$	$\mathcal{G}^{S}_{4,3}$	$\mathcal{G}^{S}_{4,4}$	$\mathcal{G}^{S}_{4,5}$
2	2	-2,9814	-0,5111	0	0,2683	-2,4592	0	0
2	3	4,2164	-0,0904	-0,7423	-0,5795	0,6640	-1,3228	0,9659
2	4	0	0	0,3780	0,3650	0,7529	2,1713	-1,7142
3	2	-4,2164	0,0904	-0,7423	0,5795	-0,6640	-1,3228	-0,9659
3	3	1,2472	-0,2673	0	-0,6061	-2,2224	0	2,9881
3	4	4,2427	-0,3031	-1,0102	-0,2532	-1,5195	-2,3212	-1,0927
4	2	0	0	-0,3780	0,3650	0,7529	-2,1713	-1,7142
4	3	-4,2427	0,3031	1,0102	0,2532	1,5195	-2,3212	1,0927
4	4	5,4773	0,3912	0	-1,1122	1,1122	0	4,2318

b) Valeur des divers coefficients pour le terme ^{3}F.

TABLEAU III-2

J'	J	$\mathcal{G}^{L}_{0,1}$	$\mathcal{G}^{L}_{2,1}$	$\mathcal{G}^{L}_{2,3}$	$\mathcal{G}^{L}_{4,3}$	$\mathcal{G}^{L}_{4,5}$
3/2	3/2	5,0596	2,5298	0,7588	0,5691	0
3/2	5/2	-2,5298	-1,2649	-1,3940	-1,0455	0
3/2	7/2	0	0	0,8942	0,6715	0
3/2	9/2	0	0	-0,1996	-0,1500	0
5/2	3/2	2,5298	1,2649	1,3940	1,0455	0
5/2	5/2	5,7471	2,8735	0,1897	0,1423	0
5/2	7/2	-2,9277	-1,4638	-1,5489	-1,1616	0
5/2	9/2	0	0	0,8122	0,6092	0
7/2	3/2	0	0	0,8942	0,6715	0
7/2	5/2	2,9277	1,4638	1,5489	1,1616	0
7/2	7/2	6,9830	3,4915	0,7658	0,5743	0
7/2	9/2	-2,5820	-1,2910	-1,7123	-1,2843	0
9/2	3/2	0	0	0,1996	0,1500	0
9/2	5/2	0	0	0,8122	0,6092	0
9/2	7/2	2,5820	1,2910	1,7123	1,2843	0
9/2	9/2	8,5635	4,2817	2,1628	1,6371	0

J'	J	$\mathcal{G}^{S}_{0,1}$	$\mathcal{G}^{S}_{2,1}$	$\mathcal{G}^{S}_{2,2}$	$\mathcal{G}^{S}_{2,3}$	$\mathcal{G}^{S}_{4,3}$	$\mathcal{G}^{S}_{4,4}$	$\mathcal{G}^{S}_{4,5}$
3/2	3/2	-3,7948	0,4337	0	-0,1518	1,3911	0	0
3/2	5/2	5,0597	-0,0361	0,4582	0,4337	-1,4908	0,9391	0
3/2	7/2	0	0	-0,3863	-0,4173	0	-2,6026	-1,3280
3/2	9/2	0	0	0	0,1333	0,2750	1,8166	1,2520
5/2	3/2	-5,0597	0,0361	0,4582	-0,4337	1,4908	0,9391	0
5/2	5/2	0,3381	0,3960	0	0,4995	1,5070	0	1,8731
5/2	7/2	5,8555	0,1255	0,7325	0,1377	-0,7099	1,3731	-1,8352
5/2	9/2	0	0	-0,4553	-0,3159	-0,9475	-3,3292	-0,3257
7/2	3/2	0	0	0,3863	-0,4173	0	2,6026	-1,3280
7/2	5/2	-5,8555	-0,1255	0,7325	-0,1377	0,7099	1,3731	1,8352
7/2	7/2	4,3643	0,1663	0	0,7658	1,9144	0	1,7413
7/2	9/2	5,1638	0,3074	0,8954	0	1,4983	2,7392	-2,0603
9/2	3/2	0	0	0	-0,1333	-0,2750	1,8166	-1,2520
9/2	5/2	0	0	0,4553	-0,3159	-0,9475	3,3292	-0,3257
9/2	7/2	-5,1638	-0,3074	0,8954	0	-1,4983	2,7392	2,0603
9/2	9/2	8,5635	-0,4078	0	1,0914	-1,0910	0	3,6422

c) Valeur des divers coefficients pour le terme ^{4}F.

TABLEAU III-2

J'	J	$\mathcal{G}^{1}_{1,1}$	$\mathcal{G}^{1}_{1,2}$	$\mathcal{G}^{1}_{2,2}$	$\mathcal{G}^{1}_{2,3}$	$\mathcal{G}^{1}_{3,3}$	$\mathcal{G}^{1}_{3,4}$
0	0	0	0	0	0	0	0
0	1	- 2	- 1	0	0	0	0
0	2	0	0	0	0	0	0
0	3	0	0	1,3997	1.0498	0	0
0	4	0	0	0	0	0	0
1	0	2	1	0	0	0	0
1	1	1	0,5	0	0	0	0
1	2	-2,6457	-1,3229	-1,2959	-0.9719	0	0
1	3	0	0	-1,7143	-1,2857	0	0
1	4	0	0	1,1222	0,8417	0	0
2	0	0	0	0	0	0	0
2	1	2,6457	1,3229	1,2959	0,9719	0	0
2	2	2,2361	1.1180	1,7885	1,3414	0	0
2	3	-2,8284	-1,4142	0,6479	0,4860	0	0
2	4	0	0	-2,1209	-1,5906	0	0
3	0	0	0	-1,3997	-1,0498	0	0
3	1	0	0	-1,7143	-1,2857	0	0
3	2	2,8284	1,4142	-0,6479	-0,4860	0	0
3	3	3.7417	1,8708	1,2080	0,9091	0	0
3	4	-2,4495	-1.2247	2,6319	1,9740	0	0
4	0	0	0	0	0	0	0
4	1	0	0	-1,1223	-0,8417	0	0
4	2	0	0	-2,1209	-1,5907	0	0
4	3	2,4495	1,2247	-2,6319	-1,9740	0	0
4	4	5,4772	2.7386	-2,2244	-1,6683	0	0

d) Valeur des divers coefficients pour le terme ^5D.

J'	J	$\mathcal{G}^{5}_{1,1}$	$\mathcal{G}^{5}_{2,1}$	$\mathcal{G}^{5}_{2,2}$	$\mathcal{G}^{5}_{3,3}$	$\mathcal{G}^{5}_{3,3}$	$\mathcal{G}^{5}_{3,4}$	$\mathcal{G}^{5}_{4,4}$
0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	1	4	-0,5	0	0	0	0	0
0	2	0	0	-0,7319	0	0	0	0
0	3	0	0	0	0,5481	0,5249	0	0
0	4	0	0	0	0	0	1,7928	0
1	0	- 4	0,5	0	0	0	0	0
1	1	2	0,5	0	0	0	0	0
1	2	5,2916	-0,3780	0.4226	-0,8034	-0,4860	0	0
1	3	0	0	-1,3363	-0,2237	-0,9643	-0,6338	0
1	4	0	0	0	0,4394	-0,3974	-2,5313	0,9258
2	0	0	0	0,7319	0	0	0	0
2	1	-5,2916	0,3780	0,4226	0,8034	0,4860	0	0
2	2	4,4722	0,7986	0	0,4377	1,0060	0	0
2	3	5,6569	0,1010	1,1065	-0,7612	1.2554	0,7187	-0,9583
2	4	0	0	-1,4638	-0,2768	0.6628	2,1023	-1,6599
3	0	0	0	0	-0,5481	-0,5249	0	0
3	1	0	0	1,3363	0,2237	-0,9643	0,6338	0
3	2	-5,6569	-0,1010	1,1065	0,7612	-1,2554	0,7187	0,9583
3	3	7,4834	0,5345	0	0,9493	-1,2121	0	1,7929
3	4	4,8989	0,6999	1,7497	-0,6871	-0,6580	-1.1397	1,8926
4	0	0	0	0	0	0	-1,7928	0
4	1	0	0	0	-0,4394	0,3974	-2,5313	-0,9258
4	2	0	0	1.4638	-0,2768	0,6628	-2,1023	-1,6599
4	3	-4,8989	-0,6999	1,7497	0,6871	0,6580	-1,1397	1,8926
4	4	10,9543	-0,7824	0	1,742	0,9708	0	-1,4106

TABLEAU III-3

Fonctions d'onde

N_1	$\pm\frac{1}{\sqrt{105}}\,\vert 4\ 0>+\frac{1}{\sqrt{5}}\vert 3\ 0>\mp\frac{2}{\sqrt{21}}\,\vert 2\ 0>+\frac{2}{\sqrt{15}}\vert 1\ 0>\mp\frac{\sqrt{2}}{\sqrt{15}}\,\vert 0\ 0>-\frac{1}{\sqrt{6}}\vert 4\ 3>\pm\frac{1}{\sqrt{6}}\vert 3\ 3>$
N_2	$\mp\frac{1}{\sqrt{21}}\,\vert 4\mp 1>+\frac{1}{\sqrt{5}}\,\vert 3\mp 1>\mp\frac{\sqrt{2}}{\sqrt{7}}\vert 2\mp 1>+\frac{\sqrt{2}}{\sqrt{15}}\,\vert 1\mp 1>-\frac{2}{\sqrt{21}}\vert 4\pm 2>+\frac{1}{\sqrt{7}}\vert 2\pm 2>$
N_3	$\mp\frac{1}{\sqrt{7}}\,\vert 4\mp 2>+\frac{1}{\sqrt{3}}\,\vert 3\mp 2>\mp\frac{2}{\sqrt{21}}\vert 2\mp 2>-\frac{1}{\sqrt{7}}\vert 4\pm 1>\mp\frac{1}{\sqrt{15}}\,\vert 3\pm 1>+\frac{1}{\sqrt{42}}\vert 2\pm 1>\pm\frac{1}{\sqrt{10}}\,\vert 1\pm 1>$
N_4	$\mp\frac{1}{\sqrt{3}}\,\vert 4\mp 3>+\frac{1}{\sqrt{3}}\vert 3\mp 3>-\frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{105}}\,\vert 4\ 0>\mp\frac{\sqrt{2}}{\sqrt{15}}\vert 3\ 0>-\frac{1}{\sqrt{42}}\,\vert 2\ 0>\pm\frac{1}{\sqrt{30}}\vert 1\ 0>+\frac{1}{\sqrt{15}}\,\vert 0\ 0>$
N_5	$\mp\sqrt{\frac{2}{3}}\,\vert 4\mp 4>-\frac{1}{\sqrt{42}}\,\vert 4\mp 1>\mp\frac{1}{\sqrt{10}}\,\vert 3\mp 1>-\frac{1}{\sqrt{7}}\,\vert 2\mp 1>\mp\frac{1}{\sqrt{15}}\,\vert 1\mp 1>$

Fonctions d'onde des doublets du chlorure ferreux.

TABLEAU III-4

	N_1	N_2	N_3	N_4	N_5
N_1	$\frac{4}{3}H_1(4F_o^S(k)-F_o^L(k))^2$	$\frac{32}{3}H_1\frac{p_f}{p_o}\vert F_o^S(k)\vert^2$			
N_2	$\frac{32}{3}H_2\frac{p_f}{p_c}\vert F_o^S(k)\vert^2$	$\frac{4}{3}H_2(2F_o^S(k)-F_o^L(k))^2$	$16H_2\frac{p_f}{p_o}\vert F_o^S(k)\vert^2$		
N_3	$16H_3\frac{p_f}{p_o}\vert F_o^S(k)\vert^2$	$\frac{4}{3}H_3\vert F_o^L(k)\vert^2$	$16H_3\frac{p_f}{p_o}\vert F_o^S(k)\vert^2$		
N_4	$16H_4\frac{p_f}{p_o}\vert F_o^S(k)\vert^2$	$\frac{4}{3}H_4(2F_o^S(k)+F_o^L(k))^2$	$\frac{32}{3}H_4\frac{p_f}{p_o}\vert F_o^S(k)\vert^2$		
N_5	$\frac{32}{3}H_5\frac{p_f}{p_o}\vert F_o^S(k)\vert^2$	$\frac{4}{3}H_5(4F_o^S(k)+F_o^L(k))^2$			

Valeur des diverses sections efficaces

(On a posé : $H_i=\left(\frac{M_N e g_N}{2mc}\right)^2\frac{e^{-E_i/k_BT}}{\sum e^{-E_j/k_BT}}$)

CHAPITRE IV

ÉTUDE DE LA LARGEUR DE RAIE

Résumé :

Dans cette dernière partie nous envisageons l'influence de l'échange entre les ions magnétiques sur les raies de diffusion des neutrons, tant élastiques qu'inélastiques, par les ions de terre rare.

Pour que le calcul puisse être effectué nous sommes conduits à trois hypothèses :

a) la distance de deux niveaux successifs est grande devant la largeur de raie. Cette hypothèse ne permet pas de traiter les transitions entre niveaux trop voisins, comme on en rencontre dans le cas de l'holmium et de l'erbium.

b) le champ d'échange est suffisamment petit en comparaison du champ cristallin. Cette approximation est justifiée pour les oxydes de terres rares où la température d'ordre, si elle existe, est de l'ordre de quelques degrés Kelvin.

c) le vecteur de diffusion est suffisamment petit pour que la section efficace puisse être donnée par la formule de Schwinger. Cette hypothèse est sûrement défectueuse pour les transitions inélastiques à haute énergie ; mais nous avons vu que celles-ci ont une section efficace très faible.

Une méthode de perturbation est alors applicable. On montre que l'action du champ d'échange se traduit par un élargissement du spectre incident. Cette largeur peut être calculée par une méthode de moments. Nous en donnons l'expression pour les raies élastiques et inélastiques. Le calcul est appliqué au cas du cérium.

On compare les résultats obtenus avec une formule établie par De Gennes dans le cas de la diffusion paramagnétique des neutrons par des corps où le champ cristallin est négligeable et le moment orbital est bloqué.

Contrairement au résultat obtenu par cet auteur, le second moment ne tend pas vers zéro avec le vecteur de diffusion k.

I - ETUDE D'UN CORPS PARAMAGNETIQUE OU LE CHAMP CRISTALLIN EST NEGLIGEABLE -

P.G. De Gennes [21] a étudié la diffusion paramagnétique des neutrons par des poudres cristallines. Nous rappelons succinctement ci-dessous les résultats obtenus par cet auteur.

On envisage ici le mouvement d'une grande assemblée de moments magnétiques électroniques couplés par des forces d'échange. Chaque moment magnétique $\vec{J}_{\vec{R}}$ est supposé lié à un site défini $\vec{R}$ du réseau. Dans la région paramagnétique nous pouvons utiliser la formule due à van Hove [22], qui donne la section efficace différentielle sous la forme :

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega\, d\varepsilon} = \frac{2}{3}\left(\frac{M_N e g_N}{2mc}\right)^2 g_J^2 \int \frac{dt}{2\pi} \sum_{\vec{R}} e^{i(\vec{k}\vec{R}-\omega t)} < \vec{J}_o(o).\vec{J}_{\vec{R}}(t) > \qquad (4\text{-}1)$$

La formule (4-1) n'est strictement valable que pour des vecteurs de diffusion assez petits pour que l'approximation de Schwinger soit utilisable.

Posons :

$$\gamma_{\vec{R}}(t) = \langle \vec{J}_o(o).\ \vec{J}_{\vec{R}}(t) \rangle \tag{4-2}$$

$$p_{\vec{k}}(\omega) = \sum_{\vec{R}} \int dt\ e^{i(\vec{k}\vec{R}-\omega t)} \frac{\gamma_{\vec{R}}(t)}{J(J+1)} \tag{4-3}$$

Le comportement statistique de l'ensemble de moments magnétiques n'apparaît dans la formule de section efficace (4-1) que par la présence de la fonction $p_{\vec{k}}(\omega)$. Il est pratique d'étudier cette fonction par l'intermédiaire de ses moments :

$$\langle \omega^n \rangle_{\vec{k}} = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} \omega^n\ p_{\vec{k}}(\omega)\ d\omega}{\int_{-\infty}^{\infty} p_{\vec{k}}(\omega)\ d\omega} \tag{4-4}$$

Les moments d'ordre impair sont nuls et, dans l'approximation choisie, il y a proportionnalité entre les moments d'ordre pair de la fonction $p_{\vec{k}}(\omega)$ et ceux du spectre des neutrons réémis.

D'après les propriétés de l'intégrale de Fourier on a :

$$\langle \omega^{2n} \rangle_{\vec{k}} = (-)^n \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k}.\vec{R}}\ \frac{\gamma_{\vec{R}}^{(2n)}(o)}{J(J+1)} \tag{4-5}$$

Expression où on a posé :

$$\gamma_{\vec{R}}^{(n)}(o) = \left[\frac{d^n \gamma_{\vec{R}}(t)}{dt^n}\right]_{t=o} \tag{4-6}$$

Dans le cas d'un cristal formé d'ions magnétiques en faible interaction le hamiltonien d'échange peut être écrit :

$$\mathcal{H} = \sum_{RR'} \Gamma_{\vec{R}-\vec{R}'}\ \vec{J}_{\vec{R}}.\ \vec{J}_{\vec{R}'} \tag{4-7}$$

et l'équation du mouvement d'un moment magnétique s'en déduit :

$$\frac{d\vec{J}_{\vec{R}}}{dt} = \frac{i}{\hbar}[\vec{J}_{\vec{R}}, \mathcal{H}] = \frac{2}{\hbar} \sum_{\vec{R}\vec{R}'} \Gamma_{\vec{R}-\vec{R}'}\ \vec{J}_{\vec{R}} \wedge \vec{J}_{\vec{R}'}\ . \tag{4-8}$$

Cette équation sous-entend que l'intégrale d'échange est indépendante du temps. Par dérivations successives de l'expression (4-8) on obtiendra l'expression des divers moments. Si l'on admet que chaque ion n'interagit qu'avec z voisins dont il est séparé par une distance b, on pourra écrire :

$$\gamma_{\vec{R}}^{(2)}(o) = \langle \vec{J}_o(o).\ [\vec{J}_{\vec{R}} \wedge \sum_{R'R''} (\vec{J}_{\vec{R}'} \wedge \vec{J}_{\vec{R}''}) + \sum_{R_1'R_2'} (\vec{J}_{\vec{R}} \wedge \vec{J}_{\vec{R}_1'}) \wedge \vec{J}_{\vec{R}_2'}] \rangle \tag{4-9}$$

R_1' et R_2' voisins de $\vec{R}$, $\vec{R}'$ voisin de $\vec{R}$, $\vec{R}''$ voisin de $\vec{R}'$.

Des règles de moyenne, que nous ne donnons pas ici, on déduit que $\gamma_{\vec{R}}(o)$ est nul sauf si $\vec{R}$ et o sont identiques. Il ne reste alors que :

$$\gamma_o^2(o) = -z\gamma_{(1)}^2(o) = -\frac{2}{3} z J^2 (J+1)^2 \left[\frac{2\Gamma}{\hbar}\right]^2$$

et :

$$\langle \omega^2 \rangle = \frac{2}{3} z J (J+1) \left(\frac{2\Gamma}{\hbar}\right)^2 \sum_{\vec{R}}' (1 - e^{i\vec{k}.\vec{R}}) \tag{4-10}$$

La sommation est restreinte aux voisins de o. La formule (4-10) est applicable au cas des mono-cristaux ; pour une poudre on aura :

$$\langle \omega^2 \rangle_{\vec{k}} = \frac{2}{3} z J (J+1) \left(\frac{2\Gamma}{\hbar}\right)^2 \left(1 - \frac{\sin kb}{kb}\right) \tag{4-11}$$

Le quatrième moment serait calculé d'une manière analogue. Son expression dépend du réseau choisi. De Gennes la donne dans le cas d'un cubique simple.

La conclusion importante, que nous pouvons tirer à ce stade, est que le second moment tend vers zéro avec k et, pour les faibles valeurs du vecteur de diffusion, est proportionnel à k^2. Il en est de même pour les autres moments. On choisit alors pour $p_{\vec{k}}(\omega)$ la forme approchée :

$$p_{\vec{k}}(\omega) \begin{cases} = \dfrac{2\,\Lambda_1 k^2}{\omega^2 + (\Lambda_1 k^2)^2} & \omega < \omega_c \\ \\ = 0 & \omega > \omega_c \end{cases} \qquad (4\text{-}12)$$

qui représente une courbe de Lorentz tronquée et qui est compatible avec les conclusions ci-dessus. Λ_1 et ω_c sont des constantes dont on obtient l'expression en comparant les deuxième et quatrième moments calculés à partir de l'expression (4-12) et directement. Dans le cas d'un corps cubique simple on a :

$$\Lambda_1 = 0,23\, b^2 \sqrt{J(J+1)}\, \frac{2\Gamma}{\hbar} \qquad (4\text{-}12\text{-a})$$

$$\omega_c = 4,5 \sqrt{J(J+1)}\, \frac{2\Gamma}{\hbar}$$

Λ_1 a les dimensions d'un coefficient de diffusion. On peut montrer qu'une fluctuation d'aimantation, dont l'évolution dans le temps se fait conformément à l'équation de diffusion :

$$\frac{\partial \vec{M}}{\partial t} = \Lambda_1 \nabla^2 \vec{M} \qquad (4\text{-}13)$$

conduit à l'expression (4-1) de la section efficace où $p_{\vec{k}}(\omega)$ est donné par la formule (4-11). Il est remarquable que la loi de diffusion (4-13) soit justifiée par le fait que tous les moments de $p_{\vec{k}}(\omega)$ tendent vers zéro comme k^2.

Il était intéressant de savoir si un tel comportement existait encore pour des ions paramagnétiques soumis aux effets d'un champ cristallin. C'est ce que nous avons voulu envisager ci-après.

II - ETUDE D'UN CORPS PARAMAGNETIQUE OU LE CHAMP CRISTALLIN N'EST PAS NEGLIGEABLE -

Nous allons étudier maintenant l'influence d'un champ d'échange sur la diffusion des neutrons par les ions de terres rares dans le domaine paramagnétique.

a) Formulation générale.

Le calcul que nous voulons mener à bien nécessite plusieurs hypothèses. Nous les introduirons aussi logiquement que possible en détachant les raisons de leur choix, leurs conséquences et leur domaine de validité.

1ère hypothèse.

Nous supposons pour commencer que les vecteurs de diffusion sont petits. Nous nous restreignons donc aux faibles transferts de moment.

Cette restriction est introduite de manière à pouvoir bénéficier de la formule de Schwinger pour les sections efficaces. Dans le cas des oxydes de terres rares cette restriction est justifiée pour deux raisons :

a) nous nous intéressons à la diffusion des neutrons lents aux petits angles. Le vecteur d'onde incident est petit. Pour les transitions élastiques le vecteur de diffusion sera nul pour un angle de diffusion nul.

b) nous avons vu, dans le deuxième chapitre, que les transitions inélastiques correspondant à un fort transfert d'énergie, et par conséquent à de forts vecteurs de diffusion, ont une section efficace petite et que l'on peut en première approximation les négliger.

Dans le cadre de cette première hypothèse la section efficace pour un ion libre sera donnée par la formule de Schwinger, savoir :

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega\, d\varepsilon} \simeq \sum_{\substack{m,n \\ \alpha_m,\alpha_n}} \Phi_n \,|\langle n\ \alpha_n|\, \vec{J}_\perp \,|\, m\ \alpha_n\rangle|^2\, \delta\left(\omega - \frac{E_m - E_n}{\hbar}\right) \tag{4-14}$$

Φ_n est le facteur de Boltzmann :

$$\Phi_n = \exp(-E_n/k_B T) \Big/ \sum_j \exp(-E_j/k_B T).$$

Nous avons adopté une notation un peu différente de celle des chapitres précédents. n repère le niveau d'énergie E_n dont l'une des d_n fonctions propres dégénérées est $|n\ \alpha_n\rangle$.

Nous nous intéressons en fait à des ions placés dans un entourage cristallin formé par d'autres ions magnétiques de même espèce et d'ions non-magnétiques. Dans l'approximation du champ cristallin effectif le hamiltonien pourra être écrit sous la forme :

$$H = \sum_i V_{cr}(i) + H_{éch}. \tag{4-15}$$

Deux termes le composent. Le premier est le champ cristallin que nous avons longuement étudié, le second est le hamiltonien d'"échange" que, sans perdre en généralité, nous écrirons :

$$H_{éch} = \sum_{\vec{R},\vec{R}'} \vec{S}_{\vec{R}}\, \tilde{\Gamma}_{\vec{R},\vec{R}'}\, \vec{S}_{\vec{R}'} = \sum_{\vec{R},\vec{R}'} J_{\vec{R}}(g-1)^2\, \tilde{\Gamma}_{\vec{R},\vec{R}'}\, \vec{J}_{\vec{R}'} = \sum_{\vec{R},\vec{R}'} \vec{J}_{\vec{R}}\, \Gamma_{\vec{R},\vec{R}'}\, \vec{J}_{\vec{R}'} \tag{4-15-b}$$

$\Gamma_{RR'}$ est le tenseur d'échange [1]. Comme nous n'envisageons que le cas des terres rares, nous avons écrit directement ce hamiltonien d'échange dans la multiplicité J.

2ème hypothèse.

Nous supposons que la température de l'échantillon est grande devant la température d'ordre.

Seul le domaine paramagnétique est pris en considération.

Dans le cas des oxydes de terres rares, cetté restriction ne diminue que fort peu le champ d'études puisque la température d'ordre, si elle existe, est de l'ordre de quelques degrés absolus.

Dans l'approximation de Born, nous pourrons écrire la section efficace de diffusion par l'assemblée des ions magnétiques :

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega\, d\varepsilon} \simeq \sum_{A,B} \Phi_A |\langle A|\, \vec{T}_\perp \,|\, B\rangle|^2\, \delta\left(\omega + \frac{E_B - E_A}{\hbar}\right) \tag{4-16}$$

$|A\rangle|B\rangle\ldots$ sont des états propres d'énergie E_A, $E_B\ldots$ du hamiltonien H. A l'approximation des petits vecteurs de diffusion (première hypothèse) l'opérateur $\vec{T}$ est :

$$\sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k}.\vec{R}}\, J_{\vec{R}}. \tag{4-17}$$

3ème hypothèse :

Nous allons supposer que le champ d'échange est petit devant le champ cristallin.

Dans le cas des oxydes de terres rares, cette hypothèse est assez bien vérifiée puisque l'intensité du champ cristallin est de l'ordre de 1000°K à comparer aux quelques degrés absolus correspondant à la température d'ordre. Le cas particulier des niveaux voisins sera examiné plus loin.

La raison de cette restriction est liée au désir de tronquer l'opérateur $\vec{T}$, de manière à faire apparaître deux sortes de termes :

a) ceux qui induisent des transitions entre deux états différents n et m du hamiltonien sans échange.

---

(1) Nous avons choisi cette forme compliquée du hamiltonien d'échange parce que nous pouvions obtenir des résultats suffisamment généraux pour ne pas dépendre de la forme particulière choisie pour le tenseur d'échange. Au paragraphe (II-b), où nous envisageons une application pratique, nous revenons à la notion familière d'intégrale d'échange.

b) ceux qui correspondent aux transitions élastiques.

Nous poserons donc :

$$\vec{T} = \sum_{n>m} \vec{T}_{n,m} + \vec{T}_e \tag{4-18}$$

avec :

$$\vec{T}_{n,m} = \sum_{\vec{R}} e^{-i\vec{k}.\vec{R}} [P_n(\vec{R}) \vec{J}_{\vec{R}} P_m(\vec{R}) + P_m(\vec{R}) \vec{J}_{\vec{R}} P_n(\vec{R})] \tag{4-19}$$

et :

$$\vec{T}_e = \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k}.\vec{R}} \sum_n [P_n(\vec{R}) \vec{J}_R P_n(\vec{R})] \tag{4-20}$$

Nous avons introduit les opérateurs de projection P_r qui projettent une fonction quelconque sur l'ensemble des fonctions de l'état r.

On a :

$$P_r = \sum_{\alpha_r} | r\ \alpha_r \rangle \langle \alpha_r\ r | \tag{4-21}$$

α_r est un indice qui repère les d_r fonctions propres dégénérées qui servent de base au niveau Γ_r.

L'opérateur $\vec{T}_{n,m}$ peut être également scindé en deux. Supposons que $E_n > E_m$. On posera :

$$\vec{T}^+_{n,m} = \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k}.\vec{R}} P_n(\vec{R}) \vec{J}_{\vec{R}} P_m(\vec{R}) \tag{4-22}$$

$$\vec{T}^-_{n,m} = \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k}.\vec{R}} P_m(\vec{R}) \vec{J}_{\vec{R}} P_n(\vec{R}) \tag{4-23}$$

Le premier opérateur correspond aux transitions hypoélastiques, le second aux transitions hyperélastiques.

4ème hypothèse.

Nous admettons maintenant que les raies de diffusion sont bien séparées, c'est-à-dire que la largeur de raie est petite devant la distance de deux raies.

Cette quatrième hypothèse complète la troisième. Elle n'est peut-être pas justifiée pour les niveaux très voisins dont nous avons reconnu l'existence dans le cas des oxydes d'holmium et d'erbium. Dans ces deux cas il ne sera pas possible de traiter convenablement les transitions élastiques et quasi-élastiques.

Dans l'expression (4-16) de la section efficace apparaît le carré d'éléments de matrice de T. La quatrième hypothèse nous autorise à ne conserver que les termes diagonaux en n et m c'est-à-dire tels que $T_{nm}\ T_{mn}$.

En effet, pour déterminer la largeur de raie de la transition (n, m) nous allons, par la suite, utiliser une méthode de moments. Introduire les termes non diagonaux revient à tenir compte de contributions indésirables qui ne sont pas nécessairement petites, ces termes correspondant à des transitions très éloignées de la raie étudiée.

La section efficace devient maintenant la somme de trois termes :

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega\, d\varepsilon} = \left(\frac{d^2\sigma}{d\Omega\, d\varepsilon}\right)_{el} + \left[\sum_{n>m} \left(\frac{d^2\sigma}{d\Omega\, d\varepsilon}\right)^+_{n,m} + \left(\frac{d^2\sigma}{d\Omega\, d\varepsilon}\right)^-_{n,m} \right]$$

avec :

$$\left(\frac{d^2\sigma}{d\Omega\, d\varepsilon}\right)_{el} = \sum_{A,B} \Phi_A |\langle A | T_{e\perp} | B \rangle|^2 \delta \left(\omega - \frac{E_B - E_A}{\hbar}\right)$$

et :

$$\left(\frac{d^2\sigma}{d\Omega\, d\varepsilon}\right)^{\pm}_{n,m} \simeq \sum_{A,B} \Phi_A |\langle A | \vec{T}^{\pm}_{n,m\perp} | B \rangle|^2 \delta \left(\omega - \frac{E_B - E_A}{\hbar}\right) \tag{4-26}$$

5ème hypothèse.

Nous allons supposer que le champ d'échange est suffisamment petit devant le champ cristallin pour qu'un traitement de perturbation au premier ordre soit justifié.

C'est de nouveau la troisième hypothèse mais énoncée ici de manière à permettre une troncature du hamiltonien d'échange. Nous introduirons, en effet, à la place de l'opérateur H_{ech} un opérateur tronqué U, "projeté" dans l'espace des états $|\, n\ \alpha_n >$.

$$U = \sum_{\vec{R},\vec{R}'} \Big[\sum_{n\neq m} (P_n(\vec{R})\, \vec{J}_{\vec{R}}\, P_n(\vec{R})\, \Gamma_{\vec{R},\vec{R}'}\ P_m(\vec{R}')\, \vec{J}_{\vec{R}'}\ P_m(\vec{R}') + P_n(\vec{R})\, \vec{J}_{\vec{R}}\, P_m(\vec{R})\, \Gamma_{\vec{R},\vec{R}'}\ P_m(\vec{R}')\, \vec{J}_{\vec{R}'}\ P_n(\vec{R}')) + \sum_n P_n(\vec{R})\, \vec{J}_{\vec{R}}\, P_n(\vec{R})\, \Gamma_{\vec{R},\vec{R}'}\ P_n(\vec{R}')\, \vec{J}_{\vec{R}'}\ P_n(\vec{R}') \Big] \qquad (4\text{-}27)$$

Cet opérateur conserve l'énergie cristalline.

Remplaçons maintenant les états $|\, A>$ d'énergie E_A du hamiltonien de départ par les états $|\, a>$ d'énergie E_a du hamiltonien tronqué. La section efficace devient :

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega\, d\varepsilon} \simeq \sum_{a,b} \Phi_a |< a\,|\, \vec{T}_\perp \,|\, b>|^2\ \delta\left(\omega - \frac{E_b - E_a}{\hbar}\right) \qquad (4\text{-}28)$$

α) Cas quasi élastique :

Nous récrivons la formule (4-28) en considérant l'opérateur $\vec{T}_e$.

$$\left(\frac{d^2\sigma}{d\Omega\, d\varepsilon}\right)_{el} \simeq \sum \Phi_a |< a\,|\, \vec{T}_{e\perp} \,|\, b>|^2\ \delta\left(\omega - \frac{E_b - E_a}{\hbar}\right) \qquad (4\text{-}29)$$

c'est-à-dire :

$$\left(\frac{d^2\sigma}{d\Omega\, d\varepsilon}\right)_{el} \simeq \int \frac{dt}{2\pi} \sum_{a,b} < a\,|\, \vec{T}_{e\perp} \,|\, b > e^{i\varepsilon_b t} < b\,|\, \vec{T}^*_{e\perp} \,|\, a > e^{-iE_a t}\ e^{-i\omega t}$$

$$= \int \frac{dt}{2\pi} \sum_a \Phi_a < a\,|\, \vec{T}_{e\perp}\ e^{i(V_{cr}+U)t}\ \ \vec{T}^*_{e\perp}\ e^{-i(V_{cr}+U)t} \,|\, a > e^{-i\omega t}$$

$$= \int \frac{dt}{2\pi} < \vec{T}_{e\perp}\ e^{i(V_{cr}+U)t}\ \ \vec{T}_{e\perp}\ e^{-i(V_{cr}+U)t} >_T\ e^{-i\omega t} \qquad (4\text{-}30)$$

Le signe $<\ \ >_T$ indique la moyenne thermique.

V_{cr} a pour états propres les états $|\, n\ \alpha_n>$. $\vec{T}_e$ est diagonal dans cette représentation, il commute donc avec V_{cr}. U a été construit de manière à conserver l'énergie cristalline, il commute avec V_{cr} . Il n'en n'est pas de même pour T_e et U qui n'ont, en général, aucune raison de commuter, même pour de faibles vecteurs de diffusion.

La section efficace devient :

$$\left(\frac{d^2\sigma}{d\Omega\, d\varepsilon}\right)_{el} \simeq \int \frac{dt}{2\pi} < \vec{T}_{e\perp}\ e^{iUt}\ \vec{T}_{e\perp}\ e^{-iUt} >_T\ e^{-i\omega t}\ dt$$

$$= \int \frac{dt}{2\pi}\, e^{i\omega t} < \vec{T}_{e\perp}(o)\ \vec{T}_{e\perp}(t) > dt$$

le spectre des neutrons incidents est bien élargi. On peut caractériser cette largeur par le second moment qui à la norme près sera :

$$< \omega^2 > \simeq \int_{-\infty}^{\infty} \omega^2\ e^{-i\omega t} < \vec{T}_{e\perp}(o)\ \vec{T}_{e\perp}(t) > dt\ d\omega$$

D'après les propriétés de l'intégrale de Fourier ceci devient :

$$< T_{e\perp} \left(\frac{d^2 \vec{T}_{e\perp}}{dt^2}\right)_{t=o} > = < \left(\frac{d\vec{T}_{e\perp}}{dt}\right)^2_{t=o} > = < [\vec{T}_{e\perp}, U]^2 >$$

Au total le moment d'ordre 2n sera (1) :

$$< \omega^{2n} > = \frac{< [\vec{T}_{e\perp}, U]^{2n} >}{< T_{e\perp}^{2n} >} \qquad (4\text{-}31)$$

Comme nous l'avons dit $\vec{T}_e$ et U ne commutent pas même si le champ est purement d'échange. Il s'ensuit que $<\omega^2>$ n'a aucune raison de tendre vers zéro avec la longueur du vecteur de diffusion.

β) Cas inélastique.

Nous nous intéressons maintenant à l'opérateur $\vec{T}_{n,m}$ couplant deux états n et m différents et fixés. Considérons par exemple, une transition hypoélastique :

$$\left(\frac{d^2\sigma}{d\Omega\, d\varepsilon}\right)^+ \simeq \sum_{a,b} \Phi_a |< a | \vec{T}^+_{n,m\perp} | b>|^2 \, \delta\left(\omega - \frac{E_b - E_a}{\hbar}\right) \qquad (4\text{-}32)$$

comme $\vec{T}_{n,m}$ a un facteur P_n à gauche $|a>$ est nécessairement un état $|n\alpha_n>$. Il s'ensuit que $\Phi_a = \Phi_n$. Nous écrirons donc :

$$\left(\frac{d^2\sigma}{d\Omega\, d\varepsilon}\right)^+ \simeq \Phi_n \int \frac{dt}{2\pi} \sum_{a,b} < a | \vec{T}^+_{n,m\perp} | b> e^{i E_b t} < b | \vec{T}^{+*}_{n,m\perp} | a> e^{-i E_a t} e^{-i\omega t} \qquad (4\text{-}33)$$

Le facteur thermique Φ_n n'intervient plus dans l'intégration et nous pouvons par conséquent écrire :

$$\left(\frac{d^2\sigma}{d\Omega\, d\varepsilon}\right)^+ \simeq \Phi_n \int \frac{dt}{2\pi} \ll T^+_{n,m\perp} \; e^{i(V_{cr}+U)t} \; \vec{T}^{+*}_{n,m\perp} \; e^{-i(V_{cr}+U)t} \gg e^{-i\omega t} \qquad (4\text{-}34)$$

La notation $\ll \quad \gg$ représente une moyenne sur tous les états également peuplés, c'est-à-dire une moyenne à température infinie. Nous savons que V_{cr} commute avec U, mais il n'a aucune raison de commuter avec $\vec{T}_{n,m}$. Cependant $\vec{T}_{n,m}$ a pour fonctions propres des fonctions propres de V_{cr}, il s'ensuit que les facteurs $e^{iV_{cr}t}$ et $e^{-iV_{cr}t}$ introduisent $\exp\left[i \frac{E_m - E_n}{\hbar} t\right]$ qui est justement le facteur de conservation d'énergie que nous désirions.

$$\left(\frac{d^2\sigma}{d\Omega\, d\varepsilon}\right)^+ \simeq \Phi_n \int \frac{dt}{2\pi} \ll \vec{T}^+_{n,m\perp} \, e^{iUt} \, \vec{T}^{+*}_{n,m\perp} \, e^{-iUt} \gg e^{-i\left(\omega - \frac{E_m - E_n}{\hbar}\right) t} \qquad (4\text{-}35)$$

Cette formule analogue à la précédente prouve que le spectre de neutrons réémis, correspondant à la perte d'énergie $E_m - E_n$, aura une largeur. Le calcul des moments est analogue au précédent et :

$$< \omega^{2n} > = \frac{\ll [T^+_{n,m\perp}, U]^{2n} \gg}{\ll T^{+2n}_{n,m\perp} \gg} \qquad (4\text{-}36)$$

La différence réside dans le fait que la moyenne se fait à température infinie. Là encore $\vec{T}_{n,m}$ et U ne commutent pas, $<\omega^2>$ ne tend pas vers zéro avec la longueur du vecteur $\vec{k}$. Il va de soi que dans l'approximation que nous avons choisie (première hypothèse) la largeur est la même pour la diffusion hypo et hyperélastique.

En conclusion, nous voyons que la présence d'un champ cristallin qui lève la dégénérescence ne permet pas d'utiliser la formule établie par De Gennes et qu'une formule de diffusion ne traduira pas correctement les fluctuations d'aimantation.

---

(1) Les moments d'ordre impair sont nuls puisque les traces de $[\vec{T}_e, U]^{2n+1}$ sont nulles ; le produit $\vec{T}_e U$ fait apparaître des puissances impaires de J.

b) Expressions des seconds moments :

Nous allons nous borner dans ce qui suit au calcul explicite des seconds moments. Nous montrerons que le résultat final ne dépend pas, comme il fallait s'y attendre, du réseau considéré (sauf par le nombre de voisins).

Nous supposerons que le tenseur $\Gamma_{\vec{R},\vec{R}'}$ est en fait une intégrale d'échange qui commute avec tous les opérateurs.

Comme nous n'aurons à calculer que des traces et que nous ne nous intéressons qu'à des poudres, nous ne changerons rien au résultat en remplaçant $\vec{T}_{e\perp}$ et $\vec{T}_{m,n\perp}$ par $\vec{T}_{ez}$ et $\vec{T}_{m,nz}$ (seul un facteur de normation nouveau apparaîtrait dans la section efficace).

Notations : Pour ne pas surcharger l'écriture nous poserons :

$$T_e = \vec{T}_{ez} = \sum_n \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k}.\vec{R}} P_n(\vec{R}) J_z(\vec{R}) P_n(\vec{R}) = \sum_{\vec{R}} T_e(\vec{R})$$

$$T_{n,m} = \vec{T}^{+}_{n,mz} = \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k}.\vec{R}} P_n(\vec{R}) J_z(\vec{R}) P_m(\vec{R}) = \sum_{\vec{R}} T_{n,m}(\vec{R})$$

$$U = \sum_{\vec{R}\neq\vec{R}'} U_{\vec{R},\vec{R}'}$$

$$U_{\vec{R},\vec{R}'} = \sum_{n,m} A_{n,n}(\vec{R}) \Gamma_{\vec{R},\vec{R}'} A_{m,m}(\vec{R}') + \sum_{\substack{n,m \\ n\neq m}} A_{n,m}(\vec{R}) \Gamma_{\vec{R},\vec{R}'} A_{m,n}(\vec{R}')$$

$$A_{n,m}(\vec{R}) = P_n(\vec{R}) \vec{J}(\vec{R}) P_m(\vec{R})$$

Nous omettrons également l'indice $\vec{R}$ chaque fois qu'il ne pourra y avoir d'ambiguité.

α) Remarque générale.

Nous avons à calculer la valeur moyenne d'un opérateur qui relie entre eux l atomes. L'opérateur densité des N atomes du cristal sera :

$$\rho = \prod_{i=1}^{N} \rho_i$$

avec :

$$\rho_i = \frac{1}{Z} e^{-H_i/k_B T}$$

H_i est le hamiltonien d'un atome (ici le champ cristallin car nous négligeons l'échange). On aura :

$$\text{Trace } \rho = (\text{Trace } \rho_i)^N = 1$$

Si l'on veut la valeur moyenne d'un opérateur $\mathcal{O}$ dépendant de l atomes on devra écrire :

$$\text{Trace } \rho\, \mathcal{O} = \text{Trace } \rho_1 \rho_2 \ldots \rho_l\, \mathcal{O}$$

Dans le cas où tous les états sont également peuplés l'action de l'opérateur ρ_i sur un de ces états introduira le facteur $1/(2J+1)$. On aura par conséquent :

$$\text{Trace } \rho\, \mathcal{O} = (2J+1)^{-l} \text{ Trace } \mathcal{O} \quad \text{(sur les l atomes)} \tag{4-37}$$

Dans le calcul du second moment des raies de diffusion inélastiques nous omettrons ce facteur que nous réintroduirons dans le résultat final.

β) Calcul du second moment de la raie inélastique.

DENOMINATEUR. Le calcul ne présente aucune difficulté. On a :

$$\ll T^2_{n,m} \gg = \text{Trace } T^2_{n,m} \simeq \sum_{\vec{R},\vec{R}'} \text{Trace } T_{n,m}(\vec{R}) \text{ Trace } T^*_{n,m}(\vec{R}') +$$

$$+ \sum_{\vec{R}} \text{Trace } T_{n,m}(\vec{R}) T^*_{n,m}(\vec{R}) = N \sum_{\alpha\beta} |\langle \alpha\ n| J_z |\beta\ n\rangle|^2 \tag{4-38}$$

car Trace $T_{n,m}(\vec{R}) = 0$, comme on le voit en calculant cette trace dans la représentation où les opérateurs P_r sont diagonaux.

NUMERATEUR. Il nous faut calculer :

$$\ll [T_{n,m}, U]^2 \gg$$

c'est-à-dire :

$$\text{Trace}\left[\sum_{\vec{R},\vec{R}',\vec{R}''} (T_{n,m}(\vec{R})\, U_{\vec{R}',\vec{R}''} - U_{\vec{R}',\vec{R}''}\, T_{n,m}(\vec{R}))\right]^2.$$

Or $T_{n,m}(\vec{R})$ commute avec $U_{\vec{R}',\vec{R}''}$ si R est différent de $\vec{R}'$ et $\vec{R}''$ simultanément. Comme nous avons supposé que $\Gamma_{\vec{R},\vec{R}'}$ est une intégrale d'échange, il s'ensuit que $U_{\vec{R},\vec{R}'}$ est symétrique, nous aurons donc à calculer :

$$4\ \text{Trace}\left[\sum_{\vec{R}} T_{n,m}(\vec{R}),\ \sum_{\substack{\vec{R}' \\ \vec{R}' \neq \vec{R}}} U_{R,R'}\right]^2. \qquad (4\text{-}39)$$

Ce calcul peut être mené de deux manières différentes.

On peut par exemple développer directement l'expression (4-39) ou bien chercher à évaluer le commutateur.

La première méthode est la plus générale. Elle permet d'exprimer formellement le numérateur en fonction des diverses composantes de J et des opérateurs de projection P_r .

La seconde méthode paraît, a priori, plus séduisante ; elle repose sur la remarque que dans l'équation (4-39) apparaissent des termes du type $P_q J_\alpha P_r J_\beta P_s$ etc.

Or on a :

$$P_q J_\alpha P_r = [P_q, J_\alpha] P_r + J_\alpha P_r \delta_{qr} = P_q [J_\alpha, P_r] + P_q J_\alpha \delta_{rq}$$

Si l'expression du commutateur $[P_q, J_\alpha]$ est simple [1] le calcul de l'expression (4-39) en sera facilité. Bien entendu la valeur de ce commutateur dépendra de chaque cas particulier envisagé. La deuxième méthode constitue donc une bonne méthode de vérification des résultats obtenus.

Nous avons utilisé ces deux méthodes dans le cas du cérium. Nous en donnons ci-après les grandes lignes.

Calcul direct. L'équation (4-39) peut encore être écrite :

$$4\ \text{Trace}\left\{\sum_{\vec{R}\,\vec{R}'} \Gamma_{\vec{R}\vec{R}'} [T_{n,m}(\vec{R}), \sum_{p,q} A_{pp}(\vec{R})\, A_{qq}(\vec{R}') + \sum_{\substack{r,s \\ r\neq s}} A_{rs}(\vec{R})\, A_{sr}(\vec{R}')]^2\right\}$$

La présence des opérateurs de projection P_t impose une égalité des indices et :

$$\begin{aligned}
\ll [T_{n,m}, U]^2 \gg \simeq 4\ \text{Trace}\Bigg[& \sum_{\vec{R},\vec{R}'} \Gamma_{\vec{R}\vec{R}'} (T_{n,m}(\vec{R})\, A_{mm}(\vec{R}) \sum_q A_{qq}(\vec{R}') - A_{nn}(\vec{R})\, T_{n,m}(\vec{R}) \sum_q A_{qq}(\vec{R}') \\
& + \sum_{\substack{s \\ s\neq m}} T_{n,m}(\vec{R})\, A_{m,s}(\vec{R})\, A_{sm}(\vec{R}') - \sum_{\substack{r \\ r\neq n}} A_{rn}(\vec{R})\, T_{n,m}(\vec{R})\, A_{n,r}(\vec{R}'))\Bigg] \\
\times \Bigg[& \sum_{\vec{R}_1,\vec{R}'_1} \Gamma_{\vec{R}_1,\vec{R}'_1} (T_{n,m}(\vec{R}_1)\, A_{mm}(\vec{R}_1) \sum_{q'} A_{q'q'}(\vec{R}'_1) - A_{nn}(\vec{R}_1)\, T_{n,m}(\vec{R}_1) \sum_{q'} A_{q'q'}(\vec{R}'_1) \\
& + \sum_{\substack{s' \\ s'\neq m}} T_{n,m}(\vec{R}_1)\, A_{m,s'}(\vec{R}_1)\, A_{s'm}(\vec{R}'_1) - \sum_{\substack{r' \\ r'\neq n}} A_{r'n}(\vec{R}_1)\, T_{n,m}(\vec{R}_1)\, A_{n,r'}(\vec{R}'_1))\Bigg]^*
\end{aligned}$$

Nous n'avons écrit cette expression que pour faire remarquer que, pour obtenir un résultat non nul, plusieurs conditions doivent être remplies.

Pour un indice donné $\vec{R}$ il est nécessaire qu'aux deux extrémités du produit d'opérateurs dont on calcule la trace, on retrouve les mêmes indices m, n, p, q, r, s, ... etc.. L'expression ci-dessus est nulle si $\vec{R}$, $\vec{R}'$, $\vec{R}_1$, $\vec{R}'_1$, sont des vecteurs différents. Un examen plus approfondi et un peu fastidieux montre qu'en définitive seules ne donnent de résultat non-nul que les combinaisons [2] :

---

(1) Le calcul de ce commutateur est aisé si on exprime P_q sous forme d'un polynôme en les puissances des composantes de J. (Cf. Appendice IV).

(2) Il est peu utile de reproduire ici les considérations qui conduisent à cette conclusion.

$$(1)\ \begin{cases} \vec{R} = \vec{R}_1 \\ \vec{R}' = \vec{R}'_1 \end{cases} \qquad (2)\ \begin{cases} \vec{R} = \vec{R}'_1 \\ \vec{R}' = \vec{R}_1 \end{cases}$$

Il s'ensuit que le résultat ne dépendra du réseau que par le nombre de voisins mis en jeu.

La première combinaison fera apparaître un terme indépendant du vecteur $\vec{k}$, la seconde introduira un facteur $\exp i\vec{k}\,(\vec{R} - \vec{R}')$.

Il vient :

$$\text{Trace} \sum_{\vec{R},\vec{R}'} \Gamma^2_{\vec{R}\vec{R}'} \left\{ \sum_q | P_n(\vec{R})\, P_q(\vec{R}')\, [J_z(\vec{R})\, P_m\, \vec{J}(\vec{R}) - \vec{J}(\vec{R})\, P_n(\vec{R})\, J_z(\vec{R})]\, .\, \vec{J}(\vec{R}')\, P_q(\vec{R}')\, P_m(\vec{R}) |^2 \right.$$

$$+ \sum_{s\neq m} | P_n(\vec{R})\, J_z\, P_m\, \vec{J}\, P_s(\vec{R}).\, P_s(\vec{R}')\, \vec{J}\, P_m(\vec{R}') |^2 + \sum_{r\neq n} | P_r(\vec{R})\, \vec{J}\, P_n\, J_z\, P_m(\vec{R}).\, P_n(\vec{R}')\, \vec{J}\, P_r(\vec{R}') |^2$$

$$+ 2\cos \vec{k}\,(\vec{R}' - \vec{R})\,(P_n(R)\, J_z\, P_m\, \vec{J}\, P_m(\vec{R}).\, P_n(\vec{R}')\, \vec{J}\, P_n(\vec{R}')\, P_m(\vec{R})\, \vec{J}\, P_n(\vec{R}).\, P_n(\vec{R}')\, \vec{J}\, P_m\, J_z\, P_n(\vec{R}')$$

$$+ P_n(\vec{R})\, \vec{J}\, P_n\, J_z\, P_m(\vec{R}).\, P_m(\vec{R}')\, \vec{J}\, P_m(\vec{R}')\, P_m(\vec{R})\, \vec{J}\, P_n(\vec{R}).\, P_m(\vec{R}')\, J_z\, P_n\, \vec{J}\, P_m(\vec{R}')$$

$$\left. - \sum_\rho P_n(\vec{R})\, J_z\, P_m\, \vec{J}\, P_\rho(\vec{R}).\, P_\rho(\vec{R}')\, \vec{J}\, P_m(\vec{R})\, P_\rho(\vec{R}')\, \vec{J}\, P_n(\vec{R}).\, P_m(\vec{R}')\, \vec{J}_z\, P_n(\vec{R})\, \vec{J}\, P_\rho(\vec{R}')) \right\} \qquad (4\text{-}40)$$

Dans le calcul de l'expression ci-dessus n'entrent en définitive (et il fallait s'y attendre) que les éléments de matrice de la forme :

$$< \alpha\ r\ r | \vec{J} | \beta\ s\ s > \quad \text{et} \quad < \alpha\ r\ r | \vec{J}\, P_q\, J_z | \beta\ s\ s > .$$

Nous en avons dressé les tableaux dans le cas du cérium dans un champ cubique ; nous ne les reproduisons pas ici.

Application au cas du cérium dans un champ cubique.

Nous avons utilisé ces tableaux pour calculer le second moment de la raie inélastique dans le cas du cérium où seuls deux niveaux existent : $n = \Gamma_7$ et $m = \Gamma_8$ et où l'origine des divers termes sera plus facilement détectable.

La valeur du dénominateur est $40\ N/9$.

Celle du numérateur est, après moyenne sur toutes les directions des cristallites, et restriction de l'intégrale d'échange aux premiers voisins sis à la distance b :

$$4\, N_z\, \Gamma^2 \left\{ \frac{2^3 \times 5^3 \times 7 \times 31}{9^3} + \frac{2^6 \times 3^2 \times 5^2}{9^3} \left(1 - \frac{\sin kb}{kb} \right) \right\} \qquad (4\text{-}41)$$

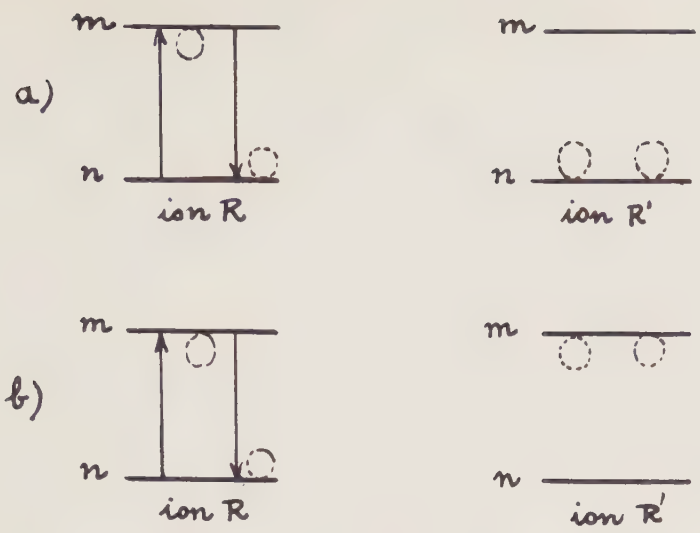
Examinons l'origine des deux termes de cette expression. Nous rencontrons d'abord un terme "constant" qui ne dépend pas du vecteur k. Il est issu du premier terme de (4-40). Si on examine en détail sa forme on voit qu'il correspond à un terme où le champ d'échange n'induit aucune transition entre les deux niveaux n et m. Nous pouvons représenter ce terme par les deux diagrammes ci-dessous. L'"action" du neutron est représentée en traits pleins, celle du champ d'échange en pointillés ; "l'ordre" des opérateurs est de gauche à droite.

On voit sur ces diagrammes que le neutron n'agit que sur l'ion R (terme indépendant de k). Il excite cet ion de n en m, le champ d'échange fournit alors une contribution "à l'intérieur de cet état", puis le neutron "désexcite" l'ion R de m en n, le champ d'échange fournissant une contribution à l'intérieur de l'état n. Quant à l'ion R', le champ d'échange qui n'induit aucune transition, y contribue par le carré de ses éléments de matrice à l'intérieur du niveau n (diagramme a) et du niveau m (diagramme b)(1).

Le premier terme de (4-41) peut être considéré comme un terme de "champ local".

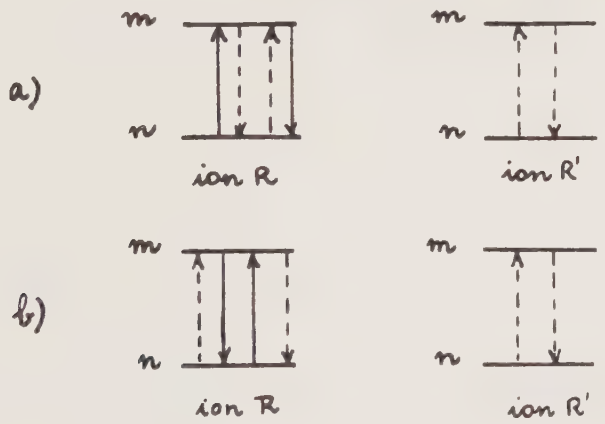
---

(1) Les états de "départ" et "d'arrivée" doivent être identiques puisque l'on calcule une trace.

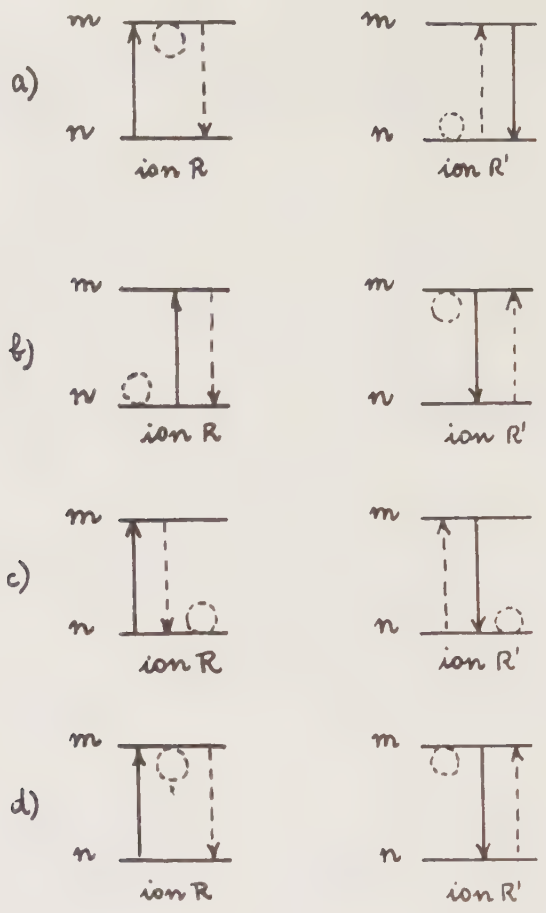


Au contraire le second terme de (4-41) provient de contributions où le champ d'échange peut induire des transitions entre les deux niveaux n et m.

Le terme indépendant du vecteur d'onde peut être représenté par les deux diagrammes :



le terme dépendant du vecteur k par les quatre diagrammes ci-dessous :



En définitive on aura :

$$\langle u^2 \rangle_{inel} = \frac{(2\Gamma)^2 z}{6} \left[\frac{25 \times 7 \times 31}{81} + \frac{40}{9} \left(1 - \frac{\sin kb}{kb} \right) \right] \qquad (4\text{-}42)$$

expression où l'on a tenu compte du facteur de normation $1/(2J+1)$ qui intervient puisqu'au numérateur on a calculé la trace d'un opérateur à deux atomes et au dénominateur celle d'un opérateur à un atome.

Calcul du commutateur.

Pour effectuer un tel calcul nous aurons à commuter les diverses composantes de J avec les opérateurs de projection P_r. Pour que cette commutation puisse être effectuée simplement il faut exprimer P_r sous forme d'un polynôme en les composantes de $\vec{J}$. Cette expression peut être obtenue directement en utilisant le développement de V_{cr} en opérateurs de Stevens (c'est-à-dire en polynômes en les composantes de J). Considérons l'opérateur :

$$P_n = \prod_{\substack{m \\ m \neq n}} \frac{V_{cr} - E_m}{E_n - E_m} \qquad (4\text{-}43)$$

Il est clair que cet opérateur agissant sur une fonction propre Ψ_r de V_{cr} d'énergie E_r donnera zéro si $r \neq n$ et Ψ_n si $r = n$. L'opérateur est bien l'opérateur cherché. Cependant l'opérateur (4-33) est un polynôme en les composantes de $\vec{J}$ de degré q (d-1) où q est le degré du polynôme V_{cr} et d le nombre de niveaux d'énergie.

Or toute composante de $\vec{J}$ élevée à la puissance 2J + p, avec p > 0 est exprimable sous forme d'un polynôme en les composantes de J de degré au plus égal à 2J. Il s'ensuit que l'opérateur P_n pourra être écrit sous la forme :

$$P_n = \sum_{\alpha n} | n\ \alpha_n >< \alpha_n\ n | = \sum_{k=o}^{2J} (J_+^k\ F_k (J_z) + F_k (J_z)\ J_-^k) , \qquad (4\text{-}44)$$

expression où $F_k (J_z)$ est un polynôme de degré 2J - K en J_z .

On pourrait obtenir (4-44) à partir de l'expression (4-43) en remplaçant les composantes de J élevées à une puissance supérieure à 2J par le polynôme équivalent. Si l'on connaît les éléments de matrice de P_n dans la multiplicité 2J + 1 il sera plus rapide de procéder par identification avec les éléments de matrice calculés à partir de (4-44). Dans l'appendice IV nous donnons la méthode générale d'obtention des polynômes (4-44).

Nous avons appliqué cette méthode au calcul du second moment de la raie de diffusion inélastique du cérium placé dans un champ cubique.

Les deux projecteurs sont :

$$P_{\Gamma_7} = -\frac{5}{6!} \left\{ 2 \left(J_z^2 - \frac{1}{4} \right) \left(7\ J_z^2 - \frac{183}{4} \right) + J_+^4 + J_-^4 \right\}$$

$$P_{\Gamma_8} = 1 - P_{\Gamma_7}$$

La seule commutation amenant à des simplifications est celle de J_z avec P_{Γ_7} et P_{Γ_8} car elle fournit un seul terme puisque nous considérons les opérateurs $T_{n,m} = P_n\ J_z\ P_m$.

Le calcul a été mené jusqu'au bout. Il donne les mêmes résultats que la première méthode dont il constitue une excellente vérification.

γ) Calcul du second moment de la raie élastique.

Nous n'avons mené ici le calcul que dans le cas où deux niveaux seulement existent. La raison fondamentale en est la complexité de l'opérateur T_e , bien supérieure à celle de $T_{n,m}$.

Il faut cependant dire à notre excuse, que, dans les cas concrets que nous avons étudiés au chapitre II, ce calcul n'a de sens que pour le cérium dans un champ cubique pour lequel les deux niveaux sont bien séparés.

Comme T_e est un opérateur de la forme $P_n\ J_z\ P_n$ il n'est plus intéressant d'utiliser les relations de commutation. Seul le calcul par développement direct a donc été utilisé.

DENOMINATEUR. Le calcul du dénominateur est immédiat, en effet :

$$\text{Trace } P_n\ J_z\ P_n = \text{Trace } P_m\ J_z\ P_m = 0.$$

Le calcul se réduit donc à celui de :

$$\text{Trace } \sum_{\vec{R}} \sum_{n} \rho_{\vec{R}}\ P_n (\vec{R})\ J_z\ P_n\ J_z\ P_n (\vec{R})$$

ce qui conduit à :

$$\sum_{n} \sum_{\alpha\beta} e^{-\varepsilon_n / k_B T} < \alpha\ n | J_z | \beta\ n >< \beta\ n | J_z | \alpha\ n > .$$

Avec les fonctions d'onde données pour le cérium cette expression vaut :

$$< T_e^2 >_T = \frac{5}{9} \frac{N}{Z} \left\{ \frac{5}{2} e^{-\varepsilon_1 / k_B T} + 13\ e^{-\varepsilon_2 / k_B T} \right\} ,$$

E_1 étant l'énergie correspondant au niveau le plus bas Γ_7 , E_2 correspondant à Γ_8 , $Z = 2\ e^{-\varepsilon_1 / k_B T} + 4\ e^{-\varepsilon_2 / k_B T}$.

NUMERATEUR. Dans le développement du carré de $[T_e, U]$ apparaîtront encore les quatre sites $\vec{R}$, $\vec{R}'$, $\vec{R}_1$, $\vec{R}_1'$.

Comme dans le cas des raies inélastiques, deux combinaisons seulement ne conduisent pas à un résultat nul. Ce sont :

$$(1)\quad \begin{cases} \vec{R} = \vec{R}_1 \\ \vec{R}' = \vec{R}_1' \end{cases} \qquad (2)\quad \begin{cases} \vec{R} = \vec{R}_1' \\ \vec{R}' = \vec{R}_1 \end{cases}$$

Cette propriété résulte de ce que :

$$\text{Trace } \rho\, P_r\, J\, P_s = 0$$

La première combinaison conduit à un terme indépendant du vecteur $\vec{k}$ qui s'écrit :

$$\text{Trace } \rho \sum_{\vec{R}\vec{R}'} \Gamma_{\vec{R},\vec{R}'} \Big\{ [P_1(\vec{R})\, J_z P_1(\vec{R}),\ P_1(\vec{R})\, \vec{J}\, P_1(\vec{R}).\ (P_1(\vec{R}')\, \vec{J}\, P_1(\vec{R}') + P_2(\vec{R}')\, \vec{J}\, P_2(\vec{R}'))]^2$$

$$+ [P_2(\vec{R})\, J_z\, P_2(\vec{R}),\ P_2(\vec{R})\, \vec{J}\, P_2(\vec{R}).\ (P_1(\vec{R}')\, \vec{J}\, P_1(\vec{R}') + P_2(\vec{R}')\, \vec{J}\, P_2(\vec{R}'))]^2$$

$$+ [(P_1(\vec{R})\, J_z\, P_1\, \vec{J}\, P_2(\vec{R}) - P_1(\vec{R})\, \vec{J}\, P_2\, J_z\, P_2(\vec{R})).\ P_2(\vec{R}')\, \vec{J}\, P_1(\vec{R}')]^2$$

$$+ [(P_2(\vec{R})\, \vec{J}\, P_1\, J_z P_1(\vec{R}) - P_2(\vec{R})\, J_z\, P_2\, \vec{J}\, P_1(\vec{R})).\ P_1(\vec{R}')\, \vec{J}\, P_2(\vec{R}')]^2 \Big\} \qquad (4\text{-}45\text{-a})$$

La seconde combinaison conduit à un terme facteur de $\cos \vec{k}(\vec{R}' - \vec{R})$ qui s'écrit :

$$\text{Trace } \rho \sum_{\vec{R},\vec{R}'} \Gamma_{\vec{R},\vec{R}'} \cos \vec{k}(\vec{R}' - \vec{R})$$

$$\times \Big\{ [P_1(\vec{R})\, J_z\, P_1(\vec{R}),\ P_1(\vec{R})\, \vec{J}\, P_1(\vec{R})] .\ P_1(\vec{R}')\, \vec{J}\, P_1(\vec{R}')\, P_1(\vec{R})\, \vec{J}\, P_1(\vec{R}).\ [P_1(\vec{R}')\, \vec{J}\, P_1(\vec{R}'), P_1(\vec{R}')\, J_z\, P_1(\vec{R}')]$$

$$+ [P_1(\vec{R})\, J_z\, P_1(\vec{R}),\ P_1(\vec{R})\, \vec{J}\, P_1(\vec{R})] .\ P_2(\vec{R}')\, \vec{J}\, P_2(\vec{R}')\, P_1(\vec{R})\, \vec{J}\, P_1(\vec{R}).\ [P_2(\vec{R}')\, \vec{J}\, P_2(\vec{R}'), P_2(\vec{R}')\, J_z\, P_2(\vec{R}')]$$

$$+ [P_2(\vec{R})\, J_z\, P_2(\vec{R}),\ P_2(\vec{R})\, \vec{J}\, P_2(\vec{R})] .\ P_1(\vec{R}')\, \vec{J}\, P_1(\vec{R}')\, P_2(\vec{R})\, \vec{J}\, P_2(\vec{R}).\ [P_1(\vec{R}_1')\, \vec{J}\, P_1(\vec{R}'), P_1(\vec{R}')\, J_z\, P_1(\vec{R}')]$$

$$+ [P_2(\vec{R})\, J_z\, P_2(\vec{R}),\ P_2(\vec{R})\, \vec{J}\, P_2(\vec{R})] .\ P_2(\vec{R}')\, \vec{J}\, P_2(\vec{R}')\, P_2(\vec{R})\, \vec{J}\, P_2(\vec{R}).\ [P_2(\vec{R}')\, J\, P_2(\vec{R}'),\ P_2(\vec{R}')\, J_z\, P_2(\vec{R}')]$$

$$+ 2 [P_1(\vec{R})(J_z P_1\, \vec{J} - \vec{J}\, P_2\, J_z)\, P_2(\vec{R}).\ P_2(\vec{R}')\, \vec{J}\, P_1(\vec{R}')\, P_2(\vec{R})\, \vec{J}\, P_1(\vec{R}).\ P_1(\vec{R}')(\vec{J}\, P_2\, J_z - J_z\, P_1\, \vec{J})\, P_2(\vec{R}')] \Big\}$$

(4-45-b)

Avec les valeurs données pour les fonctions d'onde de Γ_7 et de Γ_8 la détermination des quantités apparaissant dans les expressions (4-45) est aisée. Si on admet que l'intégrale d'échange ne relie que z voisins à la même distance b, on aura pour le second moment :

$$\langle \omega^2 \rangle = \frac{z}{Z} (2\Gamma)^2 \frac{2 \times 5}{9^2} \left\{ \left(\frac{25}{2}\right)^2 \left(1 - \frac{\sin kb}{kb}\right) e^{-2E_1/k_BT} + \left| 2^6 \times 3^2 + \overline{35}^2 \left(1 - \frac{\sin kb}{kb}\right) \right| e^{-2E_2/k_BT} \right.$$

$$\left. + 2 \left(2 \times 11 \times 251 + 17 \times 59 \left(1 - \frac{\sin kb}{kb}\right)\right) e^{-E_1/k_BT}\, e^{-E_2/k_BT} \right\} \left(\frac{5}{2} e^{-E_1/k_BT} + 13\, e^{-E_2/k_BT}\right)^{-1} \qquad (4\text{-}46)$$

On voit qu'ici encore le second moment ne tend pas vers zéro avec k^2.

Au zéro absolu, cependant, seul le niveau Γ_7 d'énergie E_1 est peuplé, $Z = 2$ et le second moment devient :

$$\langle \omega^2 \rangle_{T=0} = \frac{z}{2} (2\Gamma)^2 \left(\frac{25}{9}\right)^2 \left(1 - \frac{\sin kb}{kb}\right) \qquad (4\text{-}47\text{-a})$$

A cette température le second moment tend vers zéro avec k et est proportionnel à k^2.

D'où vient ce comportement ? Pour les faibles valeurs de k et au zéro absolu nous n'avons à considérer que la section efficace élastique à l'intérieur du doublet Γ_7 . Seuls entrent en ligne de compte des opérateurs du type :

$$P_1 \vec{J} P_1 .$$

Si on calcule les éléments de matrice de cet opérateur dans la multiplicité Γ_7 , on trouve qu'ils sont proportionnels aux éléments de matrice d'un opérateur $\vec{j} = \frac{1}{2}$. On a :

$$< \alpha \ \Gamma_7 \mid P_1 \vec{J} P_1 \mid \beta \ \Gamma_7 > = - \frac{5}{3} \ \frac{1}{2} \ m \mid \vec{j} \mid \frac{1}{2} \ m' >$$

Au zéro absolu nous nous trouvons dans la situation étudiée par de Gennes. La formule qu'il a établie est applicable. Il vient :

$$< \omega^2 >_{T=o} \ \frac{2z}{3} \left(2 \times \frac{5}{3} \Gamma \right)^2 \left(\frac{5}{3} \right)^2 \ \frac{3}{4} \ \left(1 - \frac{\sin kb}{kb} \right) \qquad (4\text{-}47\text{-}b)$$

C'est bien la formule (4-47-a).

Remarques et conclusions.

Nous avons montré dans ce qui précède que :

a) la largeur des raies élastiques et inélastiques ne se comporte pas en présence d'un champ cristallin comme pour une assemblée d'ions "libres", c'est-à-dire soumis seulement à des interactions d'échange.

b) il existe pour un vecteur de diffusion nul une largeur résiduelle que, dans le cas de la diffusion inélastique, nous avons pu relier à un effet de champ local où le champ d'échange n'induit pas de transitions entre deux niveaux d'énergie différente.

c) en ce qui concerne la raie élastique dans le cas du cérium dans un champ cubique, tout se passe, du point de vue de la dépendance en k de la largeur, comme si, au zéro absolu, l'on avait affaire à une assemblée d'ions "libres" de spin 1/2. Un tel comportement se rencontrera chaque fois que les éléments de matrice de $\vec{J}$ dans l'état fondamental seront proportionnels à ceux d'un moment cinétique $\vec{j}$.

d) dans le cas le plus général une équation de diffusion du type (4-13) ne pourra être utilisée pour décrire les fluctuations d'aimantation en présence d'un champ cristallin.

La mise en évidence de ces effets nécessite une étude du comportement des raies élastiques et inélastiques en fonction de l'angle de diffusion. Dans le cas de la raie inélastique le comportement au voisinage des faibles vecteurs de diffusion sera difficile à étudier parce que le vecteur de diffusion ne peut jamais être rigoureusement nul (sauf si l'énergie du neutron incident est égale à la distance entre les niveaux). En ce qui concerne la raie élastique, nous avons vu que le seul cas réellement intéressant est celui du cérium où les niveaux sont suffisamment distants pour éviter l'élargissement dû à la présence de raies très voisines. Il serait intéressant d'effectuer une expérience à très basse température pour vérifier le comportement en k de la largeur de raie.

CONCLUSIONS GÉNÉRALES

Nous espérons avoir, dans le cours de ce travail, pu étudier une grande partie du problème de la diffusion paramagnétique des neutrons. Nous avons pu établir les formules générales des sections efficaces dans le cas où le moment orbital doit être pris en considération. Ce travail reste cependant limité au cas où la règle de Hund garde sa validité. Il ne devrait pas être impossible de l'étendre aux cas des ions qui n'obéissent pas à cette règle ; la première partie devrait être modifiée en conséquence. Nous espérons avoir pu dégager les limites dans lesquelles le concept de moment effectif $\vec{J}$ peut être utilisé et dans lesquelles on peut utiliser sans crainte la loi classique de la dépendance angulaire de la diffusion : $I \sim \sin^2\beta$.

Nous pensons avoir pu raisonnablement expliquer et justifier les déterminations de Koehler et Wollan du rayon de la couche 4f dans les terres rares. Les calculs théoriques que nous avons pu mener sont en accord au moins qualitatif avec les déterminations expérimentales de Cribier et Jacrot des transitions inélastiques dans le cas des terres rares. Il est certain que la précision expérimentale doit être augmentée avant que l'on tente un raffinement du modèle théorique.

Dans le cas du groupe du fer nous avons pu montrer que l'observation expérimentale de transitions inélastiques doit être également possible. Il reste cependant à déterminer quels sont les corps, outre le chlorure ferreux, qui sont les plus favorables à cette étude.

Enfin l'étude de la largeur de raie nous a permis de dégager un comportement "anormal" de celle-ci dont l'étude expérimentale, bien que délicate, serait intéressante à mener.

Nous avons cru faire œuvre utile en donnant en appendice des tableaux de quantités qui peuvent être utilisées dans d'autres calculs, même dans des domaines fort éloignés de celui que nous avons envisagé.

REMERCIEMENTS

Ce travail a été entrepris sous la haute autorité de Mr le Professeur F. Perrin et a bénéficié des conseils des professeurs A. Abragam et J. Friedel que je tiens à remercier ici. Sans le professeur A. Herpin, qui a été avec constance notre guide et notre critique attentif, il n'aurait pu être mené à bien. Que celui-ci accepte l'expression de ma gratitude. Mes remerciements vont aussi à Mr P.G. de Gennes qui a été aussi sûr que clair dans ses conseils et ses suggestions.

Une grande partie des travaux scientifiques d'aujourd'hui ne sont plus l'œuvre d'un seul homme. C'est le cas de celui-ci qui entraînait une masse considérable de calculs et pour lequel la collaboration de plusieurs personnes était nécessaire. Je tiens à remercier tout particulièrement Mme S. Odiot pour son aide dans la conception et la réalisation de toute la partie concernant la diffusion par les terres rares et Mlle F. Boutron qui a accepté d'entreprendre des calculs algébriques très pénibles.

J'ai également bénéficié des avis précieux des membres du groupe de diffraction des neutrons du service de Physique du Solide et de Résonance Magnétique du Commissariat à l'Energie Atomique, et plus particulièrement de ceux de MM. D. Cribier et B. Jacrot que je tiens à remercier ici.

Enfin, sans la section de Calcul Electronique, il aurait été matériellement impossible de mener ce travail à bien; qu'elle reçoive, en la personne de son chef Mr A. Amouyal, l'expression de ma gratitude.

BIBLIOGRAPHIE

[1] G. TRAMMEL - Phys. Rev., 92, 1386 (1953).

[2] S. ODIOT et D. SAINT-JAMES - J. Phys. Chem. Solids, 17, 117 (1960).

[3] O. HALPERN et P. JOHNSON - Phys. Rev., 55, 899 (1939).

[4] A.R. EDMONDS - Angular Momentum in Quantum Mechanics, Princeton, New-Jersey (1957).

[5] J. SCHWINGER - Phys. Rev., 51, 544 (1937).

[6] W.C. KOEHLER et O. WOLLAN - Phys. Rev., 92, 1380 (1953).
W.C. KOEHLER - Phys. Rev., 110, 37 (1958).

[7] W.C. KOEHLER - Thèse University of Tennessee, juin 1953.

[8] K.W.H. STEVENS - Proc. phys. Soc., A 65, 209 (1952). Proc. Roy. Soc. A 215, 437 (1952).
R.J. ELLIOTT et K.W.H. STEVENS - Proc. Roy. Soc., A 218, 387 (1953) et A 218, 553 (1953).

[9] G.J. KYNCH - Trans. Faraday Soc., 33, 1402 (1937).

[10] F. BOUTRON et D. SAINT-JAMES - Rapport S.P.S.R.M. n°13 (mars 1960). Rapport C.E.A. n°1952.

[11] Cf. référence [8] et plus spécialement les deux premiers articles.

[12] E.P. WIGNER - Gruppen Theorie u. ihre Anwendung auf die Quanten Mechanik der Atomspektren. Chap. XII. Braunschweig (1931) et Edward Broth-Inc. Ann Arbor (Michigan) (1944).

[13] D. CRIBIER et B. JACROT - C.R. Acad. Sci., 250, 2871 (1960).

[14] D. SAINT-JAMES - La théorie des groupes en physique du solide. Editions C.D.U. et S.E.D.E.S. Paris (1960).

[15] H. BETHE et C. von der LAGE - Phys. Rev., 71, 612 (1947).

[16] D. BELL - Rev. mod. Phys., 52, 361 (1954).

[17] A. ABRAGAM - Cours sur les phénomènes liés à la résonance magnétique. Résonance électronique (et plus particulièrement le tome II). I.N.S.T.N. édit. Saclay (1956-1957).

[18] J. KANAMORI - Progr. Theor. Phys. Jap., 20, 890 (1958).

[19] R.E. WATSON - Techn. Report n°12, Solid State and Molec. Theor. Group., Mass. Inst. Tech., Cambridge (juin 1959).

[20] Y. YAMADA - J. Phys. Soc. Japan, 15, 429 (1960).

[21] P.G. de GENNES - Thèse, Université de Paris. Rapport C.E.A. n°925 (1959). Proc. Meeting on the Use of Slow Neutron Diffract. to investigate Solid State. Stockholm, 70 (1957). J. Phys. Chem. Solids, 4, 223 (1958).

[22] L. VAN HOVE - Phys. Rev., 95, 1374 (1954).

APPENDICE I[1]

Soit $\vec{X}_K$ un opérateur tensoriel, agissant entre deux multiplicités J' et J, obtenu par le produit de deux opérateurs tensoriels $\vec{T}_{k_1}$ et $\vec{T}_{k_2}$ qui agissent respectivement entre les multiplicités j'_1 et j_1, et j'_2 et j_2. Par définition on aura :

$$X^Q_K = \sum_{q_1 q_2} < k_1 q_1 \; k_2 q_2 | KQ > T^{q_1}_{k_1} \; T^{q_2}_{k_2} \tag{I-a}$$

ou bien encore :

$$T^{q_1}_{k_1} \; T^{q_2}_{k_2} = \sum_{KQ} < k_1 \, q_1 \, k_2 \, q_2 | KQ > X^Q_K . \tag{I-b}$$

En inversant le théorème de Wigner-Eckart et en tenant compte des propriétés d'orthogonalité des coefficients de Clebsch-Gordon on peut écrire :

$$< j'_1 \; j'_2 \; J' \| \vec{X}_K \| J \; j_1 \; j_2 > = \sum_{\substack{QM'M \\ m_1 m_2 \\ m'_1 m'_2}} < J'M' \; JM \; | KQ > < j_1 \; m_1 \; j_2 \; m_2 | JM >$$

$$< j'_1 \; m'_1 \; j'_2 \; m'_2 | J'M' > (-)^{j_1 + j_2 + m_1 + m_2} < j'_1 m'_1 \; j'_2 \; m'_2 \; X^Q_K \; | \; j_1 \; - \; m_1 \; j_2 \; - \; m_2 > \tag{I-c}$$

expression qui fournit l'élément de matrice réduit de $\vec{X}_K$ entre J' et J à partir des éléments de matrice de X^Q_K dans les systèmes $j_1 \, j_2$ et $j'_1 j'_2$ avant couplage.

On peut calculer maintenant d'une manière analogue les éléments de matrice réduits de $T^{q_1}_{k_1}$ et $T^{q_2}_{k_2}$. On aura :

$$\begin{aligned} & < j'_1 \; j'_2 \| \vec{T}_{k_1} \; \vec{T}_{k_2} \| j_1 \; j_2 > = < j'_1 \; j'_2 \| \vec{T}_{k_1} \| \; j_1 \; j'_2 > < j_1 \; j'_2 \| \vec{T}_{k_2} \| \; j_1 \; j_2 \\ & = (2k_1 + 1)^{1/2} \; (2k_2 + 1)^{1/2} \sum_{\substack{m_1 m'_1 m_2 m'_2 \\ q_1 q_2 Q}} < j'_1 \; m'_1 \; j_1 \; m_1 | k_1 \; q_1 > < j'_2 \; m'_2 \; j_2 \; m_2 | k_2 \; q_2 > \\ & \qquad < k_1 \; q_1 \; k_2 \; q_2 | KQ > (-)^{j_1 + j_2 + m_1 + m_2} < j'_1 \; m'_1 \; j'_2 \; m'_2 | X^Q_K | \; j_1 \; - \; m_1 \; j_2 \; - \; m_2 > \end{aligned} \tag{I-d}$$

expression où l'on a tenu compte de (I-b).

On voit que les équations obtenues sont relatives aux diverses manières de coupler j_1, j'_1, j_2, j'_2. On pourra donc écrire :

$$\begin{aligned} & < j'_1 \; j'_2 \; J' \| \vec{X}_K \| j_1 \; j_2 \; J > = \\ & \quad < j'_1 \| \vec{T}_{k_1} \| \; j_1 > < j'_2 \| \vec{T}_{k_2} \| \; j_2 > \\ & \quad [\; (2J + 1)(2J' + 1)(2K + 1) \;]^{1/2} \quad \begin{Bmatrix} j'_1 & j_1 & k_1 \\ j'_2 & j_2 & k_2 \\ J' & J & K \end{Bmatrix} \end{aligned} \tag{I-e}$$

C'est bien l'équation (1-32).

---

(1) Cf. A.R. Edmonds op. cit. p.109.

APPENDICE II

Nous développons ici, une extension de la méthode d'équivalence opératorielle de Stevens [8]. Nous reproduisons en partie un rapport C.E.A. écrit en collaboration avec F. Boutron [10], qui donne les équivalents opératoriels et les éléments de matrice des termes du développement, jusqu'à l'ordre 6, de potentiels cristallins invariants par les opérations de l'un des trente deux groupes ponctuels.

I - POTENTIELS ELECTROSTATIQUES ET OPERATEURS TENSORIELS IRREDUCTIBLES -

Le potentiel électrostatique effectif qui agit sur les électrons d'un ion A pourra être écrit :

$$V_{cr} = \sum_{B} \sum_{n} \frac{\alpha\, e^2}{|\vec{r}_B - \vec{r}_n|} \qquad \text{(II-a)}$$

expression dans laquelle $\vec{r}_n$ repère la position du nième électron de A, $\vec{r}_B$ la position de l'ion B de charge α e assimilable à une charge ponctuelle. Les sommations sont étendues à tous les ions B de l'entourage de A et à tous les électrons de A.

L'état quantique de l'ion A sera repéré par les indices L,S,J, qui définissent une multiplicité J du terme spectroscopique L S ; ces nombres quantiques étant associés à la composition des moments cinétiques $\vec{l}_n$ et $\vec{s}_n$ des n électrons de la couche incomplète i de l'ion A, et $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$. Dans l'équation (II-a) on pourra borner la sommation aux seuls électrons de la couche incomplète.

Développons V_{cr} sous forme d'une série d'opérateurs tensoriels irréductibles (ce qui est possible puisque V_{cr} obéit à l'équation de Laplace) :

$$V_{cr} = \sum_{kqB} a^q_{kB}\, T^q_k \qquad \text{(II-b)}$$

Les constantes a^q_{kB} dépendent du cas considéré.

Le théorème de Wigner-Eckart nous permet d'écrire :

$$\langle \gamma\, JM \,|\, V_{cr} \,|\, \gamma' J'M' \rangle = \sum_k \langle J \,\|\vec{T}_k\|\, J' \rangle \sum_{q,B} (-)^{J'-M'} \frac{\langle JMJ' - M' \,|\, kq \rangle}{(2k+1)^{1/2}} \times \langle \gamma \,|\, a^q_{kB} \,|\, \gamma' \rangle \qquad \text{(II-c)}$$

Les coefficients :

$$c_{k,B}(M, M') = \sum_q (-)^{J'-M'} \langle JMJ' - M' \,|\, kq \rangle \langle \gamma \,|\, a^q_{kB} \,|\, \gamma' \rangle \qquad \text{(II-d)}$$

combinaisons linéaires de coefficients de Clebsch-Gordon, où les constantes $\langle \gamma \,|\, a^q_{kB} \,|\, \gamma' \rangle$ contiennent la partie "radiale" des éléments de matrice, traduisent les propriétés "géométriques" du potentiel, tandis que dans les éléments de matrice réduits :

$$R_k = \langle J \,\|\vec{T}_k\|\, J' \rangle \qquad \text{(II-e)}$$

sont concentrés les effets dus au nombre d'électrons de A et à leur état quantique. Remarquons que pour le calcul des éléments de matrice (II-c) il nous suffit de retenir dans le développement (II-b) les valeurs de k telles que :

$$|J' - J| \leqslant k \leqslant J' + J.$$

II - CALCUL DES ELEMENTS DE MATRICE REDUITS. THEOREME FONDAMENTAL -

Il nous suffit donc en principe de déterminer les éléments de matrice réduits R_k. Leur calcul est analogue à celui mené au chapitre I. Comme le potentiel V_{cr} n'agit que sur la partie orbitale de la fonction d'onde on pourra écrire (cf. ch.I eq. (1-33))

$$R_k = \langle J \| \vec{T}_k \| J' \rangle = \langle L\, S\, J \| \vec{T}_k \| L'\, S'\, J' \rangle = (-)^{L+S+J+k} (2J+1)^{1/2} (2J'+1)^{1/2} \times \begin{Bmatrix} L & S & J \\ J' & L' & k \end{Bmatrix} \langle L \| \vec{T}_k \| L' \rangle \delta_{SS'} \qquad \text{(II-f)}$$

Pour simplifier les calculs et en tirer le théorème que nous cherchons, particularisons l'opérateur tensoriel $\vec{T}_k$ et choisissons $\vec{Y}_k(\vartheta_n, \varphi_n)$ opérateur tensoriel irréductible à un électron dont les composantes sont les $2k+1$ harmoniques sphériques. On aura :

$$\langle L \| \vec{T}_k \| L' \rangle = \alpha_{LL'} \langle L \| \sum_n \vec{Y}_k(\vartheta_n, \varphi_n) \| L' \rangle \qquad \text{(II-g)}$$

$\alpha_{LL'}$ est une constante que l'on obtiendrait facilement en comparant les deux développements en $\vec{T}_k$ et $\vec{Y}_k$.

Le calcul de l'élément de matrice réduit de $\vec{Y}_k$ a été pratiquement effectué au chapitre I (sous un autre nom $\vec{\mathcal{Y}}_k$).

Suivant la méthode utilisée alors on calculera d'abord l'élément de matrice particulier :

$$\langle LL_z \left| \sum_n Y_k^q(\vartheta_n, \varphi_n) \right| L'L'_z \rangle = (-)^{L'-L'_z} \langle L \| \sum_n \vec{Y}_k(\vartheta_n, \varphi_n) \| L' \rangle (2k+1)^{-1/2} \times \langle LL_z\, L' - L'_z | kq \rangle. \qquad \text{(II-h)}$$

L'élément de matrice du membre de gauche de (II-h) est une somme d'éléments de matrice d'opérateurs à un électron pris entre des déterminants de Slater orbitaux. On pourra écrire l'expression purement formelle :

$$\langle LL_z \left| \sum_n Y_k^q(\vartheta_n, \varphi_n) \right| L'L'_z \rangle = \sum \alpha\beta \langle ll_z | Y_k^q | ll'_z \rangle \qquad \text{(II-i)}$$

α et β sont les coefficients des états $|ll_z\rangle$ et $|ll'_z\rangle$ qui apparaissent dans les déterminants de Slater servant à décrire L et L'. La sommation est étendue aux n électrons de la couche incomplète de l'ion A. Or :

$$\langle ll_z | Y_k^q | ll'_z \rangle = (-)^{l-l'_z} \frac{\langle l \| \vec{Y}_k \| l \rangle \langle ll_z\, l - l'_z | kq \rangle}{(2k+1)^{1/2}} \qquad \text{(II-j)}$$

ce qui compte tenu de la valeur de l'élément de matrice de gauche conduit à :

$$\langle l \| \vec{Y}_k \| l \rangle = (-)^l \frac{(2l+1)(2k+1)^{1/2}}{\sqrt{4\pi}} \begin{pmatrix} l & k & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \qquad \text{(II-k)}$$

Le problème du calcul des éléments de matrice est formellement résolu puisque :

$$\langle JM | T_k^q | J'M' \rangle = A \langle J \| \vec{T}_k \| J' \rangle = B \begin{pmatrix} l & k & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \qquad \text{(II-k')}$$

Dans la sommation ci-dessus les termes non-nuls seront donc ceux tels que :

$$0 \leqslant k \leqslant 2l$$

et :

$$k \text{ pair.}$$

On en tire l'important théorème suivant, qui a été utilisé tout au long de notre travail :

THEOREME :

Dans un ion dont les termes spectroscopiques sont formés à partir d'une même sous-couche l, l'effet des termes impairs et de degré supérieur à 2l dans le développement du potentiel cristallin est nul.

Ce théorème est à rapprocher du fait que nous n'avons retenu que les termes pairs dans le développement de la section efficace obtenue au chapitre I.

III - CALCUL DIRECT DES COEFFICIENTS DE CLEBSCH-GORDON. METHODE DE STEVENS -

Chaque fois que cela sera possible on évitera l'imposant formalisme que nous avons utilisé pour démontrer le théorème précédent. On cherchera à calculer directement un élément de matrice particulier $< JM | T_k^q | J'M' >$ choisi judicieusement pour sa simplicité.

Si nous avons à calculer les éléments de matrice du potentiel entre les états d'une même multiplicité J, on fera d'une pierre deux coups en utilisant une méthode due à Stevens qui donne directement les coefficients $C_{k\beta}$ et facilement les éléments de matrice réduits.

Pour cela nous allons effectuer un regroupement des opérateurs tensoriels $\vec{T}_k$ en choisissant un mode particulier de développement de V_{cr}.

Remarquons qu'en général $r_n \ll r_\beta$. Soient x_n, y_n, z_n les composantes du vecteur unitaire de $\vec{r}_n$. On pourra développer V_{cr} en série des puissances de $\frac{r_n}{r_\beta} x_n$, $\frac{r_n}{r_\beta} y_n$, $\frac{r_n}{r_\beta} z_n$.

$$V_{cr} = \sum_\beta \sum_n \sum_k \sum_{\substack{mpq \\ (m+p+q=k)}} a_{k\beta}^{mpq} \, x_n^m \, y_n^p \, z_n^q \qquad \text{(II-1)}$$

expression dans laquelle le coefficient $a_{k\beta}^{mpq}$ est une combinaison de termes de la forme :

$$\alpha_k^{mpq} \times r_n^k / r_\beta^{k+1}, \text{ où } \alpha_k^{mpq} \text{ est une constante.}$$

Remarquons que si on exprime les cosinus directeurs x_n, y_n, z_n en fonction des angles ϑ et φ de la direction $\vec{r}_n$ avec les axes (colatitude et azimuth) on obtiendrait le développement en harmoniques sphériques dont nous avons parlé au paragraphe II, les valeurs du paramètre k se correspondant, en regroupant correctement les termes $x_n^m y_n^p z_n^q$ pour une valeur de k donnée.

Le vecteur unitaire de $\vec{r}_n$ peut être considéré comme un opérateur tensoriel d'ordre 1. D'après le théorème de Wigner-Eckart il est, dans la multiplicité J, proportionnel à l'opérateur $\vec{J}$.

On pourra donc remplacer partout x_n, y_n, z_n par J_x, J_y, J_z mais en prenant bien garde à la non-commutation des diverses composantes de J. On aura :

$$V_{cr} \simeq \sum_\beta \sum_k A_\beta^k < J \| \mathcal{T}_k \| J > \sum_{\substack{mpq \\ m+p+q=k}} \left\{ J_x^m \, J_y^p \, J_z^q \right\} \, b_k^{mpq} \qquad \text{(II-m)}$$

Le terme entre accolade est par définition la somme des $k!/m!p!q!$ permutations du produit $J_x^m \, J_y^p \, J_z^q$. Il est clair que :

$$b_k^{mpq} = \alpha_k^{mpq} \, \frac{m!\,p!\,q!}{k!}$$

A_k^β est une constante qui ne contient que des termes radiaux. $< J \| \mathcal{T}_k \| J >$ ne dépend, bien entendu, que de k.

L'avantage de cette équivalence opératorielle de Stevens apparaît si au lieu d'utiliser les opérateurs J_x et J_Y on introduit les opérateurs J_+ et J_- qui remplacent, dans le développement (II-1) $x_n + i y_n$ et $x_n - i y_n$.

Le calcul des éléments de matrice se fera alors directement car :

$$J_z^p \, | JM > = M^p \, | JM >$$

$$J_\pm^p \, | JM > = \left[\frac{(J \pm M + p)! \;\; (J \mp M)!}{(J \pm M)! \;\; (J \mp M - p)!} \right]^{1/2} | JM \pm p > \qquad \begin{pmatrix} -J \leqslant M + p \leqslant J \\ 0 \text{ ailleurs} \end{pmatrix}$$

L'expression (II-m) peut être très lourde. On aura intérêt à la récrire sous une forme plus compacte en choisissant un ordre déterminé pour $J_+ J_- J_z$, par exemple $J_+^m J_-^p J_z^q$, les autres termes de $\{J_+^m J_-^p J_z^q\}$ étant ramenés au premier par le jeu successif des commutations.

Il reste à calculer la constante $< J \| J_z \| J >$ qui ne dépend que de k. On choisira un élément de matrice particulier :

$$< JM \Big| \sum_n x_n^m \, y_n^p \, z_n^q \Big| JM' >$$

Le meilleur choix sera en général :

$$< JM \Big| \sum_n z_n^k \Big| JM' > \simeq < J \| \mathcal{T}_k \| J > < JM | J_z^k | JM >$$

et le calcul se mènera selon la méthode déjà utilisée.

Si on a affaire au couplage Russel-Saunders et à la règle de Hund, on écrira :

$$| JM > = \sum_{L_z S_z} a \, | LL_z > | SS_z >$$

et le calcul deviendra celui de :

$$< LL_z \Big| \sum_n z_n^k \, | LL_z > = < L \| \mathcal{T}_k \| L > < LL_z | L_z^k | LL_z >$$

puis en posant :

$$| LL_z > = \sum A \, | ll_{z_1} > | ll_{z_2} > \ldots | ll_{z_n} >$$

on aboutira au calcul d'éléments de matrice d'opérateurs à un électron pris entre des déterminants de Slater orbitaux, c'est-à-dire :

$$< ll_z | z_n^k | ll'_z > = < l \| \mathcal{T}_k \| l > < ll_z | l_z^k | ll'_z >$$

qui fourniront la valeur finale de $< J \| \mathcal{T}_k \| J >$.

On retrouvera en particulier les cas de nullité cités au théorème général puisque :

$$z_n^k = Y_k^o (\vartheta_n , \varphi_n)$$

Dans le cas des terres rares les quantités :

$$\beta = < J \| \mathcal{T}_k \| J >$$

ont été calculées par Stevens [8].

IV - CAS DES POTENTIELS INVARIANTS PAR LES OPERATIONS D'UN GROUPE -

Si, pour un certain type de voisins de l'ion A, les atomes B s'échangent les uns dans les autres par les opérations d'un groupe ponctuel $\mathcal{G}_p$ on aura intérêt à regrouper les termes qui leur correspondent dans le développement de V_{cr}. Leur contribution s'écrira :

$$V_{cr}(B) = \sum_n \sum_k \sum_{\substack{mpq \\ (m+p+q=k)}} a_k^{mpq}(n) \, x_n^m \, y_n^p \, z_n^q \qquad \text{(II-n)}$$

avec :

$$a_k^{mpq}(n) = \frac{r_n^k}{r_B^{k+1}} \, \alpha_k^{mpq}$$

L'indice B caractérise maintenant le type de voisins considérés.

Les constantes α_k^{mpq} ne dépendent que de la symétrie de l'entourage considéré de l'ion A. Seules certaines valeurs de m, p, q, apparaîtront. On écrira en fait :

$$V_{cr}(B) = \sum_n \sum_k \sum_t \frac{r_n^k}{r_B^{k+1}} \, A_k^t \, K_k^t(n) \qquad \text{(II-o)}$$

A_k^t est une constante, $K_k^t(n)$ est un polynôme homogène de degré k en x_n, y_n, z_n qui peut servir de base à la représentation irréductible unité G_1 de $\mathcal{G}_p$. (Harmoniques réticulaires).

L'indice t est nécessaire car il peut arriver que plusieurs polynômes de même degré, orthogonaux entre eux, puissent servir de base à G_1. Remarquons que ces polynômes doivent satisfaire à l'équation de Laplace.

Les tables de ces polynômes ont été données par H. Bethe et C. Von der Lage [15] pour les groupes Oh et O et par D. Bell [16] pour les trente deux groupes ponctuels. On trouvera une discussion de leurs propriétés dans le cours de D. Saint-James [14].

Les équivalents opératoriels à ces polynômes (c'est-à-dire les expressions de la forme (II-m) et les éléments de matrice correspondant se trouvent dans le rapport de F. Boutron et D. Saint-James déjà cité. Bien entendu, seules les valeurs paires de k sont prises en considération, et nous les avons limitées à k = 6.

APPENDICE III

I - CONSIDERATIONS GENERALES DE THEORIE DES GROUPES -

Les considérations, que nous voulons développer ici, l'ont été originellement par H. Bethe [15] et par E.P. Wigner [12].

On en trouvera également un exposé dans le cours de A. Abragam [17] et une synthèse, plus particulièrement consacrée à la physique du solide, dans le cours de D. Saint-James [14].

Considérons une équation séculaire du type (2-11), c'est-à-dire telle que :

$$\det |\langle JM|V_{cr}|JM'\rangle - \lambda \langle JM|JM'\rangle| = 0 \qquad \text{(III-a)}$$

Que peut-on dire, a priori, des valeurs propres de cette équation, sachant que V_{cr} est invariant par les opérations d'un groupe ponctuel $\mathcal{G}_p$ [1].

Les $2J + 1$ vecteurs $|JM\rangle$ forment une base pour la représentation irréductible D^J du groupe des rotations.

Le groupe $\mathcal{G}_p$ correspond à une symétrie inférieure à la symétrie sphérique et, par conséquent, D^J cesse d'être irréductible.

Elle sera réduite en représentations irréductibles correspondant au groupe $\mathcal{G}_p$. Ceci signifie que les $2J + 1$ fonctions $|JM\rangle$ ne peuvent pas, en général, rester dégénérées. La résolution de l'équation (III-a) va mener à l'obtention de valeurs propres (pouvant être en partie dégénérées) et les vecteurs propres correspondants, combinaisons linéaires des vecteurs $|JM\rangle$, pourront servir de base aux représentations irréductibles apparaissant dans la décomposition de D^J.

Deux cas doivent, cependant, être distingués.

a) J est entier. D^J est une représentation à une détermination. Les rotations d'angle ω et $\omega + 2\pi$ autour d'un axe sont équivalentes. D^J sera réduite en représentations irréductibles de $\mathcal{G}_p$.

b) J est demi-entier. D^J est une représentation à deux déterminations. Les rotations d'angle ω et $\omega + 2\pi$ autour d'un axe ne sont plus équivalentes. Les fonctions $|JM\rangle$ s'apparentent aux spineurs. Il est vain de chercher à réduire D^J en les représentations irréductibles de $\mathcal{G}_p$. Nous devons considérer le groupe double qui est défini de la manière suivante.

A chacun des éléments g de $\mathcal{G}_p$ caractérisé par une rotation d'angle ω, nous faisons correspondre deux éléments de $\mathcal{G}_p^+$: l'élément g lui-même et un élément $\bar{g}$ qui correspond à la même opération que g mais où la rotation est d'angle $\omega + 2\pi$. $\mathcal{G}_p^+$ qui a deux fois plus d'éléments que $\mathcal{G}_p$, a pour représentations irréductibles :

a) les représentations irréductibles de $\mathcal{G}_p$ et :

$$\chi(g) = + \chi(\bar{g})$$

b) des représentations irréductibles supplémentaires et :

$$\chi(g) = - \chi(\bar{g})$$

---

(1) On appelle groupe ponctuel un groupe dont les opérations ne sont que des rotations ou des rotations suivies d'inversions. (Cf. D. Saint-James op. cit. chap. I).

Ces dernières ne sont pas en nombre égal aux précédentes.

$\chi(g)$ est le caractère de la représentation pour l'élément g. Comme D^J est une représentation à deux déterminations :

$$D^J(g) = -D^J(\overline{g})$$

Il s'ensuit que, dans sa réduction, seules apparaîtront les représentations supplémentaires du groupe double.

Dans l'appendice II nous avons montré que le potentiel V_{cr} pouvait être développé en série de polynômes homogènes de degré pair en x, y, z (ou J_x, J_y, J_z). Autrement dit si $\mathcal{G}_p$ (ou $\mathcal{G}_p^+$ ne contient pas l'inversion l'expression de V_{cr} intervenant dans (III-a) sera néanmoins invariante dans cette opération.

Soient $\mathcal{G}_p$ et $\mathcal{G}_{p'}$ deux groupes (simples ou doubles) tels que $\mathcal{G}_p$ contienne tous les éléments de $\mathcal{G}_{p'}$, augmentés de l'ensemble des éléments I_g, $g \in \mathcal{G}_{p'}$, où I est l'opération d'inversion. Les représentations irréductibles de $\mathcal{G}_p$ se divisent en deux ensembles, au même nombre d'éléments :

a) celui des représentations pour lesquelles :

$$\chi(g) = \chi(Ig)$$

c'est l'ensemble des représentations "positives".

b) l'ensemble des représentations pour lesquelles :

$$\chi(g) = -\chi(Ig)$$

Le fait que V_{cr} ne contienne que des termes pairs nous permet d'affirmer que, dans la réduction de D^J, seules apparaîtront les représentations irréductibles positives de $\mathcal{G}_p$.

On dit souvent que dans la réduction de D^J seules apparaissent les représentations de $\mathcal{G}_{p'}$. Ceci n'est pas tout à fait exact, car les deux ensembles de représentations de $\mathcal{G}_p$ dégénèrent pour fournir l'ensemble des représentations de $\mathcal{G}_{p'}$. Quoiqu'il en soit il suffira dans les calculs de se borner à considérer les représentations irréductibles de $\mathcal{G}_{p'}$; on montrerait aisément que le résultat obtenu est correct si l'on remplace les représentations de $\mathcal{G}_{p'}$ par les représentations positives de $\mathcal{G}_p$.

En particulier les fonctions servant de base aux représentations de $\mathcal{G}_{p'}$ sont celles qui sous-tendent les représentations positives de $\mathcal{G}_p$.

Nous aurons donc à réduire D^J en les représentations d'un groupe, simple ou double, ne contenant pas l'inversion. On écrira :

$$D^J = \sum_i n_i G^i$$

Le nombre des racines distinctes de l'équation (III-a) sera nécessairement égal à :

$$\sum_i n_i$$

et ces racines se grouperont en n_1 racines de dégénérescence d_1, n_2 de dégénérescence d_2 etc. (d_1, d_2 sont les dimensions des représentations irréductibles correspondantes) et :

$$2J + 1 = \sum_i n_i d_i$$

II - FORMATION DE FONCTIONS A SYMETRIE CONVENABLE -

Lors de la réduction de la représentation D^J, l'espace à 2J + 1 dimensions sous-tendu par les vecteurs $|JM\rangle$ se décompose en sous-espaces invariants par les opérations du groupe, correspondant aux représentations irréductibles apparaissant. E.P. Wigner a établi une méthode qui permet de former des combinaisons linéaires de fonctions qui appartiennent à un des sous-espaces correspondant à une représentation irréductible donnée.

Pour cela considérons un ensemble de fonctions $f_k^j (k = 1, 2, \ldots d_j)$ appelées partenaires, qui forment une base pour la représentation irréductible G^j. Chacune de ces fonctions se transforme par les opérations g du groupe en s'échangeant avec ses partenaires selon la relation :

$$g f_i^j = \sum_{k=1}^{d_j} [G^j(g)]_{ki} f_k^j \qquad (i = 1,2,\ldots d_j) \qquad \text{(III-b)}$$

où $G^j(g)$ est la matrice correspondant à la représentation irréductible G^j. Chacun des partenaires f_i^j est dit fonction à symétrie convenable appartenant à la i-ème ligne de la j-ème représentation irréductible.

Compte tenu des propriétés d'orthogonalité des matrices des représentations irréductibles nous écrirons :

$$\sum_g [G^j(g)]^*_{ik} \; g f_i^j = \sum_g \sum_{k'=1} [G^j(g)]^*_{ik} \; [G^j(g)]_{k'i} f_{k'}^{j'} = f_k^{j'}$$

ce qui permet, étant donné f_i^j de déterminer ses partenaires.

En particulier la condition nécessaire et suffisante pour que f_i^j soit une fonction à symétrie convenable appartenant à la i-ème ligne de la j-ème représentation irréductible sera :

$$f_i^j = \sum_g [G^j(g)]^*_{ii} \; g f_i^j$$

E.P. Wigner a montré qu'un ensemble de partenaires comme celui défini par (III-b) forme un ensemble complet et que toute fonction U est alors développable en série des f_i^j :

$$U = \sum_{j=1}^{L} \sum_{i=1}^{d_j} f_i^j$$

Il est clair, par ailleurs, que toute combinaison linéaire de fonctions appartenant à la i-ème ligne de la j-ème représentation irréductible est une fonction du même type.

Parmi tous les ensembles de partenaires nous en choisirons un une fois pour toutes que nous appellerons : base standard adaptée à la représentation irréductible G^j et qui nous permettra de calculer explicitement les éléments de matrice de G^j pour chaque opération du groupe.

Dans le cas des groupes ponctuels ces bases standards adaptées ont été données par H. Bethe [15] et D. Bell [16] sous forme d'harmoniques réticulaires. Si l'on a affaire à un groupe double on obtiendra la base standard adaptée assez facilement à partir de ces fonctions (1).

Nous possédons une collection de fonctions $|JM>$ que nous voulons utiliser pour résoudre le problème posé par l'équation (III-a). Nous sommes désireux de trouver des combinaisons linéaires de ces fonctions qui peuvent servir de base à l'une des représentations irréductibles apparaissant dans la réduction de D^j.

L'opérateur :

$$P_{ik}^j = \sqrt{\frac{d_j}{N}} \sum_g [G^j(g)]^*_{ik} \; g \qquad \text{(N : nombre d'éléments du groupe)}$$

obéit aux relations suivantes :

$$[P_{ii}^j]^2 = P_{ii}^j$$

$$[P_{ik}^j]^2 = 0 \qquad \text{pour } i \neq k$$

les relations d'orthogonalité nous conduisent à :

$$P_{ik}^j \; f_l^{j'} = f_i^j \; \delta_{kl} \; \delta_{jj'}$$

il s'ensuit que :

$$\left.\begin{aligned} P_{ik}^j \; U &= f_i^j \\ P_{ki}^j \; U &= f_k^j \end{aligned}\right\} \qquad \text{(III-d)}$$

Ainsi si l'on donne à k les d_j valeurs possibles $(1,2,\ldots d_j)$, on obtiendra des combinaisons linéaires de fonctions U se transformant comme f_i^j, c'est-à-dire appartenant à la i-ème ligne de la j-ème représentation irréductible.

---

(1) Voir R.J. Elliot, Phys. Rev. 96, 280 (1951) et D. Saint-James op. cit. [14].

Remarquons que l'opérateur P^j_{11} est un opérateur de projection qui projette les fonctions U sur la fonction de base f^j_1.

Considérons les fonctions gU obtenues par l'action sur U de toutes les opérations du groupe. La combinaison linéaire la plus générale de toutes les projections de ces fonctions sur la fonction de base f^j_1 sera :

$$\sum_{g'} \alpha_{g'} P^j_{11} g'U = \sum_{g'} \alpha_{g'} [G^j(g)]^*_{11} g(g'U) = \sum_{g''} \alpha_{g'} [G^j(g''g'^{-1})]^*_{11} g''U$$

$$= \sum_{g''} \alpha_{g'} [G^j(g^{-1})]^*_{k1} [G^j(g'')]^*_{1k} g''U = \sum_k \sum_g \alpha_k [G^j(g)]^*_{1k} gU$$

$$= \sum_k \alpha_k P^j_{1k} U.$$

car le produit de deux opérations du groupe est une opération du groupe.

Ainsi la combinaison la plus générale de fonctions U se transformant comme f^1_j est donnée par l'application de tous les opérateurs P^j_{1k} d'une même ligne :

$$\sum_{k=1}^{d_j} \alpha_k P^j_{1k} U.$$

Parmi les diverses combinaisons P^j_{1k} U, certaines donneront le même résultat. On peut connaître a priori combien seront différentes.

En effet ce nombre sera évidemment égal au nombre de fois où la représentation G^j apparaît dans la représentation sous-tendue par les fonctions gU.

Dans le cas qui nous intéresse les fonctions gU sont des combinaisons linéaires des fonctions $|JM>$. Elles forment au plus $2J + 1$ combinaisons linéaires distinctes, et l'application des opérateurs P^j_{1k} correspondant à la i-ème ligne de la j-ème représentation irréductible G^j, conduira à n_j fonctions linéairement distinctes, n_j étant le nombre de fois que la représentation G^j apparaît dans la réduction de D^J.

Nous formerons donc les combinaisons du type (III-c) $\gamma^j_{i,\rho}$ qui appartiennent à la i-ème ligne de la j-ème représentation irréductible G^j. L'équation séculaire (III-a) se factorisera et deviendra :

$$\det |< \gamma^j_{i,\rho} | V_{cr} | \gamma^j_{i,\rho'} > - \lambda < \gamma^j_{i,\rho} | \gamma^j_{i,\rho'} >| = 0$$

équation de degré n_j.

Les énergies fournies seront celles qui correspondent à la représentation considérée.

Une fois obtenue une de ces fonctions, on pourra toujours former ses partenaires par application de la formule (III-d).

III - CAS DU GROUPE DU CUBE. O.

Nous allons maintenant donner la formation des bonnes fonctions adaptées aux représentations irréductibles du groupe O ou de son groupe double O^+.

Nous choisissons tout d'abord une base standard adaptée pour chacune des représentations irréductibles du groupe O et du groupe double O^+. Le tableau A-3-1 reproduit la liste de ces fonctions.

Pour le groupe O. ou le groupe O^+, les opérations sont des rotations autour d'axes divers. Elles peuvent toujours être ramenées à une succession de rotations autour des axes z et y et les angles d'Euler correspondants, α, β, γ, ne peuvent prendre que les valeurs 0, π, $\pm \pi/2$ pour le groupe simple et outre ces valeurs 2π, 3π, $3\pi/2$, $5\pi/2$, pour le groupe double.

Dans une telle opération, le vecteur $|JM>$ se transforme selon :

$$g|JM> = \sum_{M'} \mathcal{D}^J_{M',M}(\omega) |JM'> = \sum_{M'} e^{iM'\frac{\alpha}{2}} e^{iM\frac{\gamma}{2}} d^J_{M',M}(\beta) |JM'>$$

Les matrices de rotations $d^j_{M',M}(\beta)$ ont des expressions simples pour les angles 0, π, 2π, 3π. Pour les angles $\pm\pi/2$, $3\pi/2$, $5\pi/2$ on les déduira des relations de récurrence (1).

---

(1) Cf. Edmonds op. cit. ch.IV.

$$-2M\, d^{J}_{M',M}(\pi/2) = \sqrt{J(J+1) - M'(M'+1)}\, d^{J}_{M'+1,M}(\pi/2) + \sqrt{J(J+1) - M'(M'-1)}\, d^{J}_{M'-1,M}(\pi/2)$$

$$d^{J}_{M,J}(\pi/2) = (-)^{J-M}\left[\frac{(2J)!}{(J+M)!\ (J-M)!}\right]^{1/2}$$

$$d^{J}_{M',M}(\beta) = d^{J}_{M,M'}(\beta) \qquad d^{J}_{M',M}(\pi+\beta) = (-)^{J-M'}\, d^{J}_{-M',M}(\beta)$$

Les matrices $G^{j}(g)$ qui permettent de former les fonctions :

$$\gamma^{j}_{i,p}$$

seront établies à partir des bases standard adaptées choisies.

Le tableau A-3-2 donne les diverses matrices de rotation $d^{J}_{M',M}(\pi/2)$ pour les valeurs de J qui apparaissent dans les terres rares étudiées, et les tableaux A-3-3 donnent la forme générale des fonctions pouvant servir de base à une représentation irréductible du groupe 0 ou du groupe 0^{+}.

Compte tenu de ces formules, il est facile d'obtenir un ensemble de fonctions appartenant à la i-ème ligne de la j-ème représentation irréductible puis après une diagonalisation entre ces fonctions d'obtenir les fonctions de bases que nous avons données dans le tableau V du chapitre II.

TABLEAU A3-1

Rep	d	Fonctions
Γ_1	1	Cte
Γ_2	1	$(105)^{1/2}\ x\,y\,z$
Γ_3	2	$\sqrt{5}\left[z^2 - \frac{1}{2}(x^2 + y^2)\right]$ $\sqrt{15}\ (x^2 - y^2)$
Γ_4	3	$\sqrt{3}\ x$ $\sqrt{3}\ y$ $\sqrt{3}\ z$
Γ_5	3	$\sqrt{15}\ x\,y$ $\sqrt{15}\ y\,z$ $\sqrt{15}\ z\,x$
Γ_6	2	$\left\vert \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \right>$ $\left\vert \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right>$
Γ_7	2	$(105)^{1/2}\ x\,y\,z \left\vert \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \right>$ $(105)^{1/2}\ x\,y\,z \left\vert \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right>$
Γ_8	4	$\left\vert \frac{3}{2} + \frac{3}{2} \right>$ $\left\vert \frac{3}{2} + \frac{1}{2} \right>$ $\left\vert \frac{3}{2} - \frac{1}{2} \right>$ $\left\vert \frac{3}{2} - \frac{3}{2} \right>$

Bases "standard" adaptées aux représentations irréductibles des groupes du cube 0 et 0^+.

TABLEAU A3-2

Matrices de rotation : $d^{J}_{M',M}\left(\frac{\pi}{2}\right)$

J = 1/2

$\frac{1}{2}$		
	$\sqrt{2}$	$\sqrt{2}$
	$-\sqrt{2}$	$\sqrt{2}$

J = 1

$\frac{1}{2}$			
	1	$\sqrt{2}$	1
	$-\sqrt{2}$	0	$\sqrt{2}$
	1	$-\sqrt{2}$	1

J = 3/2

$\frac{1}{4}$				
	$\sqrt{2}$	$\sqrt{2}\sqrt{3}$	$\sqrt{2}\sqrt{3}$	$\sqrt{2}$
	$-\sqrt{2}\sqrt{3}$	$-\sqrt{2}$	$\sqrt{2}$	$\sqrt{2}\sqrt{3}$
	$\sqrt{2}\sqrt{3}$	$-\sqrt{2}$	$-\sqrt{2}$	$\sqrt{2}\sqrt{3}$
	$-\sqrt{2}$	$\sqrt{2}\sqrt{3}$	$-\sqrt{2}\sqrt{3}$	$\sqrt{2}$

J = 2

$\frac{1}{4}$					
	1	2	$\sqrt{2}\sqrt{3}$	2	1
	-2	-2	0	2	2
	$\sqrt{2}\sqrt{3}$	0	2	0	$\sqrt{2}\sqrt{3}$
	-2	2	0	-2	2
	1	-2	$\sqrt{2}\sqrt{3}$	-2	1

J = 5/2

$\frac{1}{2^3}$

$\sqrt{2}$	$\sqrt{2}\sqrt{5}$	$2\sqrt{5}$	$2\sqrt{5}$	$\sqrt{2}\sqrt{5}$	$\sqrt{2}$
$-\sqrt{2}\sqrt{5}$	$-3\sqrt{2}$	-2	2	$3\sqrt{2}$	$\sqrt{2}\sqrt{5}$
$2\sqrt{5}$	2	$-2\sqrt{2}$	$-2\sqrt{2}$	2	$2\sqrt{5}$
$-2\sqrt{5}$	2	$2\sqrt{2}$	$-2\sqrt{2}$	-2	$2\sqrt{5}$
$\sqrt{2}\sqrt{5}$	$-3\sqrt{2}$	2	2	$-3\sqrt{2}$	$\sqrt{2}\sqrt{5}$
$-\sqrt{2}$	$\sqrt{2}\sqrt{5}$	$-\sqrt{5}$	$\sqrt{5}$	$-\sqrt{2}\sqrt{5}$	$\sqrt{2}$

J = 3

$\frac{1}{2^3}$

1	$\sqrt{2}\sqrt{3}$	$\sqrt{3}\sqrt{5}$	$2\sqrt{5}$	$\sqrt{3}\sqrt{5}$	$\sqrt{2}\sqrt{3}$	1
$-\sqrt{2}\sqrt{3}$	-4	$-\sqrt{2}\sqrt{5}$	0	$\sqrt{2}\sqrt{5}$	4	$\sqrt{2}\sqrt{3}$
$\sqrt{3}\sqrt{5}$	$\sqrt{2}\sqrt{5}$	-1	$-4\sqrt{3}$	-1	$\sqrt{2}\sqrt{5}$	$\sqrt{3}\sqrt{5}$
$-2\sqrt{5}$	0	$4\sqrt{3}$	0	$4\sqrt{3}$	0	$2\sqrt{5}$
$\sqrt{3}\sqrt{5}$	$-\sqrt{2}\sqrt{5}$	-1	$4\sqrt{3}$	-1	$-\sqrt{2}\sqrt{5}$	$\sqrt{3}\sqrt{5}$
$-\sqrt{2}\sqrt{3}$	4	$-\sqrt{2}\sqrt{5}$	0	$\sqrt{2}\sqrt{5}$	-4	$\sqrt{2}\sqrt{3}$
1	$-\sqrt{2}\sqrt{3}$	$\sqrt{3}\sqrt{5}$	$-2\sqrt{5}$	$\sqrt{3}\sqrt{5}$	$-\sqrt{2}\sqrt{3}$	1

TABLEAU A3-2

Matrices de rotation : $d^{J}_{M',M}\left(\frac{\pi}{2}\right)$

TABLEAU A3-2

Matrices de rotation : $d^{J}_{M',M}\left(\frac{\pi}{2}\right)$

J = 7/2

$\frac{1}{2^4}$

$\sqrt{2}$	$\sqrt{2}\sqrt{7}$	$\sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{7}$	$\sqrt{2}\sqrt{5}\sqrt{7}$	$\sqrt{2}\sqrt{5}\sqrt{7}$	$\sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{7}$	$\sqrt{2}\sqrt{7}$	$\sqrt{2}$
$-\sqrt{2}\sqrt{7}$	$-5\sqrt{2}$	$-3\sqrt{2}\sqrt{3}$	$-\sqrt{2}\sqrt{5}$	$\sqrt{2}\sqrt{5}$	$3\sqrt{2}\sqrt{3}$	$5\sqrt{2}$	$\sqrt{2}\sqrt{7}$
$\sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{7}$	$3\sqrt{2}\sqrt{3}$	$\sqrt{2}$	$-\sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{5}$	$-\sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{5}$	$\sqrt{2}$	$3\sqrt{2}\sqrt{3}$	$\sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{7}$
$-\sqrt{2}\sqrt{5}\sqrt{7}$	$-\sqrt{2}\sqrt{5}$	$\sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{5}$	$3\sqrt{2}$	$-3\sqrt{2}$	$-\sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{5}$	$\sqrt{2}\sqrt{5}$	$\sqrt{2}\sqrt{5}\sqrt{7}$
$\sqrt{2}\sqrt{5}\sqrt{7}$	$-\sqrt{2}\sqrt{5}$	$-\sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{5}$	$3\sqrt{2}$	$3\sqrt{2}$	$-\sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{5}$	$-\sqrt{2}\sqrt{5}$	$\sqrt{2}\sqrt{5}\sqrt{7}$
$-\sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{7}$	$3\sqrt{2}\sqrt{3}$	$-\sqrt{2}$	$-\sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{5}$	$\sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{5}$	$\sqrt{2}$	$3\sqrt{2}\sqrt{3}$	$\sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{7}$
$\sqrt{2}\sqrt{7}$	$-5\sqrt{2}$	$3\sqrt{2}\sqrt{3}$	$-\sqrt{2}\sqrt{5}$	$-\sqrt{2}\sqrt{5}$	$3\sqrt{2}\sqrt{3}$	$-5\sqrt{2}$	$\sqrt{2}\sqrt{7}$
$-\sqrt{2}$	$\sqrt{2}\sqrt{7}$	$-\sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{7}$	$\sqrt{2}\sqrt{5}\sqrt{7}$	$-\sqrt{2}\sqrt{5}\sqrt{7}$	$\sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{7}$	$-\sqrt{2}\sqrt{7}$	$\sqrt{2}$

TABLEAU A3-2

Matrices de rotation : $d^{J}_{M',M}\left(\frac{\pi}{2}\right)$

J = 4

$\frac{1}{2^4}$

1	$2\sqrt{2}$	$2\sqrt{7}$	$2\sqrt{2}\sqrt{7}$	$\sqrt{2}\sqrt{5}\sqrt{7}$	$2\sqrt{2}\sqrt{7}$	$2\sqrt{7}$	$2\sqrt{2}$	1
$-2\sqrt{2}$	-2×3	$-2\sqrt{2}\sqrt{7}$	$-2\sqrt{7}$	0	$2\sqrt{7}$	$2\sqrt{2}\sqrt{7}$	2×3	$2\sqrt{2}$
$2\sqrt{7}$	$2\sqrt{2}\sqrt{7}$	4	$-2\sqrt{2}$	$-2\sqrt{2}\sqrt{5}$	$-2\sqrt{2}$	4	$2\sqrt{2}\sqrt{7}$	$2\sqrt{7}$
$-2\sqrt{2}\sqrt{7}$	$-2\sqrt{7}$	$-2\sqrt{2}$	2×3	0	-2×3	$-2\sqrt{2}$	$2\sqrt{7}$	$2\sqrt{2}\sqrt{7}$
$\sqrt{2}\sqrt{5}\sqrt{7}$	0	$-2\sqrt{2}\sqrt{5}$	0	2×3	0	$-2\sqrt{2}\sqrt{5}$	0	$\sqrt{2}\sqrt{5}\sqrt{7}$
$-2\sqrt{2}\sqrt{7}$	$2\sqrt{7}$	$2\sqrt{2}$	-2×3	0	2×3	$-2\sqrt{2}$	$-2\sqrt{7}$	$2\sqrt{2}\sqrt{7}$
$2\sqrt{7}$	$-2\sqrt{2}\sqrt{7}$	4	$2\sqrt{2}$	$-2\sqrt{2}\sqrt{5}$	$2\sqrt{2}$	4	$-2\sqrt{2}\sqrt{7}$	$2\sqrt{7}$
$-2\sqrt{2}$	2×3	$-2\sqrt{2}\sqrt{7}$	$2\sqrt{7}$	0	$-2\sqrt{7}$	$2\sqrt{2}\sqrt{7}$	-2×3	$2\sqrt{2}$
1	$-2\sqrt{2}$	$2\sqrt{7}$	$-2\sqrt{2}\sqrt{7}$	$\sqrt{2}\sqrt{5}\sqrt{7}$	$-2\sqrt{2}\sqrt{7}$	$2\sqrt{7}$	$-2\sqrt{2}$	1

TABLEAU A3-2

Matrices de rotation : $d^{J}_{M',M}\left(\frac{\pi}{2}\right)$

J = 9/2

$\sqrt{2}$	$3\sqrt{2}$	$2 \times 3 \times \sqrt{2}$	$2\sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{7}$	$2 \times 3 \times \sqrt{7}$	$2 \times 3 \times \sqrt{7}$	$2\sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{7}$	$2 \times 3 \times \sqrt{2}$	$3\sqrt{2}$	$\sqrt{2}$
$-3\sqrt{2}$	$-7\sqrt{2}$	$-2 \times 5\sqrt{2}$	$-2\sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{7}$	$-2\sqrt{7}$	$2\sqrt{7}$	$2\sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{7}$	$2 \times 5\sqrt{2}$	$7\sqrt{2}$	$3\sqrt{2}$
$2 \times 3\sqrt{2}$	$2 \times 5\sqrt{2}$	$8\sqrt{2}$	0	$-4\sqrt{7}$	$-4\sqrt{7}$	0	$8\sqrt{2}$	$2 \times 5\sqrt{2}$	$2 \times 3\sqrt{2}$
$-2\sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{7}$	$-2\sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{7}$	0	$8\sqrt{2}$	$4\sqrt{3}$	$-4\sqrt{3}$	$-8\sqrt{2}$	0	$2\sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{7}$	$2\sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{7}$
$2 \times 3\sqrt{7}$	$2\sqrt{7}$	$-4\sqrt{7}$	$-4\sqrt{3}$	$2 \times 3\sqrt{2}$	$2 \times 3\sqrt{2}$	$-4\sqrt{3}$	$-4\sqrt{7}$	$2\sqrt{7}$	$2 \times 3\sqrt{7}$
$-2 \times 3\sqrt{7}$	$2\sqrt{7}$	$4\sqrt{7}$	$-4\sqrt{3}$	$-2 \times 3\sqrt{2}$	$2 \times 3\sqrt{2}$	$4\sqrt{3}$	$-4\sqrt{7}$	$-2\sqrt{7}$	$2 \times 3\sqrt{7}$
$2\sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{7}$	$-2\sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{7}$	0	$8\sqrt{2}$	$-4\sqrt{3}$	$-4\sqrt{3}$	$8\sqrt{2}$	0	$-2\sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{7}$	$2\sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{7}$
$-2 \times 3\sqrt{2}$	$2 \times 5\sqrt{2}$	$-8\sqrt{2}$	0	$4\sqrt{7}$	$-4\sqrt{7}$	0	$8\sqrt{2}$	$-2 \times 5\sqrt{2}$	$2 \times 3\sqrt{2}$
$3\sqrt{2}$	$-7\sqrt{2}$	$2 \times 5\sqrt{2}$	$-2\sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{7}$	$2\sqrt{7}$	$2\sqrt{7}$	$-2\sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{7}$	$2 \times 5\sqrt{2}$	$-7\sqrt{2}$	$3\sqrt{2}$
$-\sqrt{2}$	$3\sqrt{2}$	$-2 \times 3\sqrt{2}$	$2\sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{7}$	$-2 \times 3\sqrt{7}$	$2 \times 3\sqrt{7}$	$-2\sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{7}$	$2 \times 3\sqrt{2}$	$-3\sqrt{2}$	$\sqrt{2}$

$\frac{1}{2^6}$

TABLEAU A3-2

Matrices de rotation : $d^{J}_{M',M}\left(\frac{\pi}{2}\right)$

J = 5

$\frac{1}{2^5}$

1	$\sqrt{2}\sqrt{5}$	$3\sqrt{5}$	$2\sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{5}$	$\sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{5}\sqrt{7}$	$2 \times 3\sqrt{7}$	$\sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{5}\sqrt{7}$	$2\sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{5}$	$3\sqrt{5}$	$\sqrt{2}\sqrt{5}$	1
$-\sqrt{2}\sqrt{5}$	-8	$-9\sqrt{2}$	$-8\sqrt{3}$	$-2\sqrt{3}\sqrt{7}$	0	$2\sqrt{3}\sqrt{7}$	$8\sqrt{3}$	$9\sqrt{2}$	8	$\sqrt{2}\sqrt{5}$
$3\sqrt{5}$	$9\sqrt{2}$	13	$2\sqrt{2}\sqrt{3}$	$-\sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{7}$	$-2\sqrt{5}\sqrt{7}$	$-\sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{7}$	$2\sqrt{2}\sqrt{3}$	13	$9\sqrt{2}$	$3\sqrt{5}$
$-2\sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{5}$	$-8\sqrt{3}$	$-2\sqrt{2}\sqrt{3}$	8	$4\sqrt{7}$	0	$-4\sqrt{7}$	-8	$2\sqrt{2}\sqrt{3}$	$8\sqrt{3}$	$2\sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{5}$
$\sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{5}\sqrt{7}$	$2\sqrt{3}\sqrt{7}$	$-\sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{7}$	$-4\sqrt{7}$	2	$2\sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{5}$	2	$-4\sqrt{7}$	$-\sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{7}$	$2\sqrt{3}\sqrt{7}$	$\sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{5}\sqrt{7}$
$-2 \times 3\sqrt{7}$	0	$2\sqrt{5}\sqrt{7}$	0	$-2\sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{5}$	0	$2\sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{5}$	0	$-2\sqrt{5}\sqrt{7}$	0	$2 \times 3\sqrt{7}$
$\sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{5}\sqrt{7}$	$-2\sqrt{3}\sqrt{7}$	$-\sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{7}$	$4\sqrt{7}$	2	$-2\sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{5}$	2	$4\sqrt{7}$	$-\sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{7}$	$-2\sqrt{3}\sqrt{7}$	$\sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{5}\sqrt{7}$
$-2\sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{5}$	$8\sqrt{3}$	$-2\sqrt{2}\sqrt{3}$	-8	$4\sqrt{7}$	0	$-4\sqrt{7}$	8	$2\sqrt{2}\sqrt{3}$	$-8\sqrt{3}$	$2\sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{5}$
$3\sqrt{5}$	$9\sqrt{2}$	13	$-2\sqrt{2}\sqrt{3}$	$-\sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{7}$	$2\sqrt{5}\sqrt{7}$	$-\sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{7}$	$-2\sqrt{2}\sqrt{3}$	13	$-9\sqrt{2}$	$3\sqrt{5}$
$-\sqrt{2}\sqrt{5}$	8	$-9\sqrt{2}$	$8\sqrt{3}$	$-2\sqrt{3}\sqrt{7}$	0	$2\sqrt{3}\sqrt{7}$	$-8\sqrt{3}$	$9\sqrt{2}$	-8	$\sqrt{2}\sqrt{5}$
1	$-\sqrt{2}\sqrt{5}$	$3\sqrt{5}$	$-2\sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{5}$	$\sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{5}\sqrt{7}$	$-2 \quad 3\sqrt{7}$	$\sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{5}\sqrt{7}$	$-2\sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{5}$	$3\sqrt{5}$	$-\sqrt{2}\sqrt{5}$	1

TABLEAU A3-2

Matrices de rotation : $d^{J}_{M',M}\left(\frac{\pi}{2}\right)$

J = 11/2

$\sqrt{2}$	$\sqrt{2}\sqrt{11}$	$\sqrt{2}\sqrt{5}\sqrt{11}$	$\sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{5}\sqrt{11}$	$2\sqrt{3}\sqrt{5}\sqrt{11}$	$2\sqrt{3}\sqrt{7}\sqrt{11}$	$2\sqrt{3}\sqrt{7}\sqrt{11}$	$2\sqrt{3}\sqrt{5}\sqrt{11}$	$\sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{5}\sqrt{11}$	$\sqrt{2}\sqrt{5}\sqrt{11}$	$\sqrt{2}\sqrt{11}$	$\sqrt{2}$
$-\sqrt{2}\sqrt{11}$	$-9\sqrt{2}$	$-7\sqrt{2}\sqrt{5}$	$-5\sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{5}$	$-2\times 3\sqrt{3}\sqrt{5}$	$-2\sqrt{3}\sqrt{7}$	$2\sqrt{3}\sqrt{7}$	$2\times 3\sqrt{3}\sqrt{5}$	$5\sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{5}$	$7\sqrt{2}\sqrt{5}$	$9\sqrt{2}$	$\sqrt{2}\sqrt{11}$
$\sqrt{2}\sqrt{5}\sqrt{11}$	$7\sqrt{2}\sqrt{5}$	$19\sqrt{2}$	$7\sqrt{2}\sqrt{3}$	$-2\sqrt{3}$	$-2\sqrt{3}\sqrt{5}\sqrt{7}$	$-2\sqrt{3}\sqrt{5}\sqrt{7}$	$-2\sqrt{3}$	$7\sqrt{2}\sqrt{3}$	$19\sqrt{2}$	$7\sqrt{2}\sqrt{5}$	$\sqrt{2}\sqrt{5}\sqrt{11}$
$-\sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{5}\sqrt{11}$	$-5\sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{5}$	$-7\sqrt{2}\sqrt{3}$	$5\sqrt{2}$	2×11	$2\sqrt{5}\sqrt{7}$	$-2\sqrt{5}\sqrt{7}$	-2×11	$-5\sqrt{2}$	$7\sqrt{2}\sqrt{3}$	$5\sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{5}$	$\sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{5}\sqrt{11}$
$2\sqrt{3}\sqrt{5}\sqrt{11}$	$2\times 3\sqrt{3}\sqrt{5}$	$-2\sqrt{3}$	-2×11	$-2\times 3\sqrt{2}$	$2\sqrt{2}\sqrt{5}\sqrt{7}$	$2\sqrt{2}\sqrt{5}\sqrt{7}$	$-2\times 3\sqrt{2}$	-2×11	$-2\sqrt{3}$	$2\times 3\sqrt{3}\sqrt{5}$	$2\sqrt{3}\sqrt{5}\sqrt{11}$
$-2\sqrt{3}\sqrt{7}\sqrt{11}$	$-2\sqrt{3}\sqrt{7}$	$2\sqrt{3}\sqrt{5}\sqrt{7}$	$2\sqrt{5}\sqrt{7}$	$-2\sqrt{2}\sqrt{5}\sqrt{7}$	$-2\times 5\sqrt{2}$	$2\times 5\sqrt{2}$	$2\sqrt{2}\sqrt{5}\sqrt{7}$	$-2\sqrt{5}\sqrt{7}$	$-2\sqrt{3}\sqrt{5}\sqrt{7}$	$2\sqrt{3}\sqrt{7}$	$2\sqrt{3}\sqrt{7}\sqrt{11}$
$2\sqrt{3}\sqrt{7}\sqrt{11}$	$-2\sqrt{3}\sqrt{7}$	$-2\sqrt{3}\sqrt{5}\sqrt{7}$	$2\sqrt{5}\sqrt{7}$	$2\sqrt{2}\sqrt{5}\sqrt{7}$	$-2\times 5\sqrt{2}$	$-2\times 5\sqrt{2}$	$2\sqrt{2}\sqrt{5}\sqrt{7}$	$2\sqrt{5}\sqrt{7}$	$-2\sqrt{3}\sqrt{5}\sqrt{7}$	$-2\sqrt{3}\sqrt{7}$	$2\sqrt{3}\sqrt{7}\sqrt{11}$
$-2\sqrt{3}\sqrt{5}\sqrt{11}$	$2\times 3\sqrt{3}\sqrt{5}$	$2\sqrt{3}$	-2×11	$2\times 3\sqrt{2}$	$2\sqrt{2}\sqrt{5}\sqrt{7}$	$-2\sqrt{2}\sqrt{5}\sqrt{7}$	$-2\times 3\sqrt{2}$	2×11	$-2\sqrt{3}$	$-2\times 3\sqrt{3}\sqrt{5}$	$2\sqrt{3}\sqrt{5}\sqrt{11}$
$\sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{5}\sqrt{11}$	$-5\sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{5}$	$7\sqrt{2}\sqrt{3}$	$5\sqrt{2}$	-2×11	$2\sqrt{5}\sqrt{7}$	$2\sqrt{5}\sqrt{7}$	-2×11	$5\sqrt{2}$	$7\sqrt{2}\sqrt{3}$	$-5\sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{5}$	$\sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{5}\sqrt{11}$
$-\sqrt{2}\sqrt{5}\sqrt{11}$	$7\sqrt{2}\sqrt{5}$	$-19\sqrt{2}$	$7\sqrt{2}\sqrt{3}$	$2\sqrt{3}$	$-2\sqrt{3}\sqrt{5}\sqrt{7}$	$2\sqrt{3}\sqrt{5}\sqrt{7}$	$-2\sqrt{3}$	$-7\sqrt{2}\sqrt{3}$	$19\sqrt{2}$	$-7\sqrt{2}\sqrt{5}$	$\sqrt{2}\sqrt{5}\sqrt{11}$
$\sqrt{2}\sqrt{11}$	$-9\sqrt{2}$	$7\sqrt{2}\sqrt{5}$	$-5\sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{5}$	$2\times 3\sqrt{3}\sqrt{5}$	$-2\sqrt{3}\sqrt{7}$	$-2\sqrt{3}\sqrt{7}$	$2\times 3\sqrt{3}\sqrt{5}$	$-5\sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{5}$	$7\sqrt{2}\sqrt{5}$	$-9\sqrt{2}$	$\sqrt{2}\sqrt{11}$
$-\sqrt{2}$	$\sqrt{2}\sqrt{11}$	$-\sqrt{2}\sqrt{5}\sqrt{11}$	$\sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{5}\sqrt{11}$	$-2\sqrt{3}\sqrt{5}\sqrt{11}$	$2\sqrt{3}\sqrt{7}\sqrt{11}$	$-2\sqrt{3}\sqrt{7}\sqrt{11}$	$2\sqrt{3}\sqrt{5}\sqrt{11}$	$-\sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{5}\sqrt{11}$	$\sqrt{2}\sqrt{5}\sqrt{11}$	$-\sqrt{2}\sqrt{11}$	$\sqrt{2}$

TABLEAU A3-2

Matrices de rotation : $d^{J}_{M',M}\left(\frac{\pi}{2}\right)$

J = 6

1	$2\sqrt{3}$	$\sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{11}$	$2\sqrt{5}\sqrt{11}$	$3\sqrt{5}\sqrt{11}$	$\frac{2\times 3}{\sqrt{2}\sqrt{11}}$	$\frac{2\sqrt{3}}{\sqrt{7}\sqrt{11}}$	$\frac{2\times 3}{\sqrt{2}\sqrt{11}}$	$3\sqrt{5}\sqrt{11}$	$2\sqrt{5}\sqrt{11}$	$\sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{11}$	$2\sqrt{3}$	1
$-2\sqrt{3}$	-2×5	$-4\sqrt{2}\sqrt{11}$	$\frac{-2\sqrt{3}}{\sqrt{5}\sqrt{11}}$	$\frac{-2\sqrt{3}}{\sqrt{5}\sqrt{11}}$	$\frac{-2\sqrt{2}}{\sqrt{3}\sqrt{11}}$	0	$\frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{3}\sqrt{11}}$	$\frac{2\sqrt{3}}{\sqrt{5}\sqrt{11}}$	$\frac{2\sqrt{3}}{\sqrt{5}\sqrt{11}}$	$4\sqrt{2}\sqrt{11}$	2×5	$2\sqrt{3}$
$\sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{11}$	$4\sqrt{2}\sqrt{11}$	2×13	$\frac{4\sqrt{2}}{\sqrt{3}\sqrt{5}}$	$\sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{5}$	$-8\sqrt{3}$	$\frac{-2\times 3}{\sqrt{2}\sqrt{7}}$	$-8\sqrt{3}$	$\sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{5}$	$\frac{4\sqrt{2}}{\sqrt{3}\sqrt{5}}$	2×13	$4\sqrt{2}\sqrt{11}$	$\sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{11}$
$-2\sqrt{5}\sqrt{11}$	$\frac{-2\sqrt{3}}{\sqrt{5}\sqrt{11}}$	$\frac{-4\sqrt{2}}{\sqrt{3}\sqrt{5}}$	-2	2×9	$\frac{2\times 3}{\sqrt{2}\sqrt{5}}$	0	$\frac{-2\times 3}{\sqrt{2}\sqrt{5}}$	-2×9	2	$\frac{4\sqrt{2}}{\sqrt{3}\sqrt{5}}$	$\frac{2\sqrt{3}}{\sqrt{5}\sqrt{11}}$	$2\sqrt{5}\sqrt{11}$
$3\sqrt{5}\sqrt{11}$	$\frac{2\sqrt{3}}{\sqrt{5}\sqrt{11}}$	$\sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{5}$	-2×9	-17	$2\sqrt{2}\sqrt{5}$	$\frac{2\sqrt{3}}{\sqrt{3}\sqrt{7}}$	$2\sqrt{2}\sqrt{5}$	-17	-2×9	$\sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{5}$	$\frac{2\sqrt{3}}{\sqrt{5}\sqrt{11}}$	$3\sqrt{5}\sqrt{11}$
$\frac{-2\times 3}{\sqrt{2}\sqrt{11}}$	$\frac{-2\sqrt{2}}{\sqrt{3}\sqrt{11}}$	$8\sqrt{3}$	$\frac{2\times 3}{\sqrt{2}\sqrt{5}}$	$-2\sqrt{2}\sqrt{5}$	-4×5	0	4×5	$2\sqrt{2}\sqrt{5}$	$\frac{-2\times 3}{\sqrt{2}\sqrt{5}}$	$-8\sqrt{3}$	$\frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{3}\sqrt{11}}$	$\frac{2\times 3}{\sqrt{2}\sqrt{11}}$
$\frac{2\sqrt{3}}{\sqrt{7}\sqrt{11}}$	0	$\frac{-2\times 3}{\sqrt{2}\sqrt{7}}$	0	$\frac{2\sqrt{3}}{\sqrt{5}\sqrt{7}}$	0	-4×5	0	$\frac{2\sqrt{3}}{\sqrt{5}\sqrt{7}}$	0	$\frac{-2\times 3}{\sqrt{2}\sqrt{7}}$	0	$\frac{2\sqrt{3}}{\sqrt{7}\sqrt{11}}$
$\frac{-2\times 3}{\sqrt{2}\sqrt{11}}$	$\frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{3}\sqrt{11}}$	$8\sqrt{3}$	$\frac{-2\times 3}{\sqrt{2}\sqrt{5}}$	$-2\sqrt{2}\sqrt{5}$	4×5	0	-4×5	$2\sqrt{2}\sqrt{5}$	$\frac{2\times 3}{\sqrt{2}\sqrt{5}}$	$-8\sqrt{3}$	$\frac{-2\sqrt{2}}{\sqrt{3}\sqrt{11}}$	$\frac{2\times 3}{\sqrt{2}\sqrt{11}}$
$3\sqrt{5}\sqrt{11}$	$\frac{-2\sqrt{3}}{\sqrt{5}\sqrt{11}}$	$\sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{5}$	2×9	-17	$-2\sqrt{2}\sqrt{5}$	$\frac{2\sqrt{3}}{\sqrt{3}\sqrt{7}}$	$-2\sqrt{2}\sqrt{5}$	-17	2×9	$\sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{5}$	$\frac{-2\sqrt{3}}{\sqrt{5}\sqrt{11}}$	$3\sqrt{5}\sqrt{11}$
$-2\sqrt{5}\sqrt{11}$	$\frac{2\sqrt{3}}{\sqrt{5}\sqrt{11}}$	$\frac{-4\sqrt{2}}{\sqrt{3}\sqrt{5}}$	2	2×9	$\frac{-2\times 3}{\sqrt{2}\sqrt{5}}$	0	$\frac{2\times 3}{\sqrt{2}\sqrt{5}}$	-2×9	-2	$\frac{4\sqrt{2}}{\sqrt{3}\sqrt{5}}$	$\frac{-2\sqrt{3}}{\sqrt{5}\sqrt{11}}$	$2\sqrt{5}\sqrt{11}$
$\sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{11}$	$-4\sqrt{2}\sqrt{11}$	2×13	$\frac{-4\sqrt{2}}{\sqrt{3}\sqrt{5}}$	$\sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{5}$	$8\sqrt{3}$	$\frac{-2\times 3}{\sqrt{2}\sqrt{7}}$	$8\sqrt{3}$	$\sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{5}$	$\frac{-4\sqrt{2}}{\sqrt{3}\sqrt{5}}$	2×13	$-4\sqrt{2}\sqrt{11}$	$\sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{11}$
$-2\sqrt{3}$	2×5	$-4\sqrt{2}\sqrt{11}$	$\frac{2\sqrt{3}}{\sqrt{5}\sqrt{11}}$	$\frac{-2\sqrt{3}}{\sqrt{5}\sqrt{11}}$	$\frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{3}\sqrt{11}}$	0	$\frac{-2\sqrt{2}}{\sqrt{3}\sqrt{11}}$	$\frac{2\sqrt{3}}{\sqrt{5}\sqrt{11}}$	$\frac{-2\sqrt{3}}{\sqrt{5}\sqrt{11}}$	$4\sqrt{2}\sqrt{11}$	-2×5	$2\sqrt{3}$
1	$-2\sqrt{3}$	$\sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{11}$	$-2\sqrt{5}\sqrt{11}$	$3\sqrt{5}\sqrt{11}$	$\frac{-2\times 3}{\sqrt{2}\sqrt{11}}$	$\frac{2\sqrt{3}}{\sqrt{7}\sqrt{11}}$	$\frac{-2\times 3}{\sqrt{2}\sqrt{11}}$	$3\sqrt{5}\sqrt{11}$	$-2\sqrt{5}\sqrt{11}$	$\sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{11}$	$-2\sqrt{3}$	1

$\frac{1}{2^6}$

TABLEAU A3-2

Matrices de rotation : $d^{J}_{M',M}\left(\frac{\pi}{2}\right)$

J = 13/2

$\sqrt{2}$	$\sqrt{2}\sqrt{13}$	$2\sqrt{3}\sqrt{13}$	$2\sqrt{11}\sqrt{13}$	$\frac{\sqrt{2}\sqrt{5}}{\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$\frac{3\sqrt{2}}{\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$\frac{2\sqrt{2}\sqrt{3}}{\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$\frac{2\sqrt{2}\sqrt{3}}{\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$\frac{3\sqrt{2}}{\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$\frac{\sqrt{2}\sqrt{5}}{\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$2\sqrt{11}\sqrt{13}$	$2\sqrt{3}\sqrt{13}$	$\sqrt{2}\sqrt{13}$	$\sqrt{2}$
$-\sqrt{2}\sqrt{13}$	$-11\sqrt{2}$	$-2\times 9\sqrt{3}$	$-2\times 7\sqrt{11}$	$\frac{-5\sqrt{2}}{\sqrt{5}\sqrt{11}}$	$-9\sqrt{2}\sqrt{11}$	$\frac{-2\sqrt{2}}{\sqrt{3}\sqrt{11}}$	$\frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{3}\sqrt{11}}$	$9\sqrt{2}\sqrt{11}$	$\frac{5\sqrt{2}}{\sqrt{5}\sqrt{11}}$	$2\times 7\sqrt{11}$	$2\times 9\sqrt{3}$	$11\sqrt{2}$	$\sqrt{2}\sqrt{13}$
$2\sqrt{3}\sqrt{13}$	$2\times 9\sqrt{3}$	$2\times 17\sqrt{2}$	$\frac{6\sqrt{2}}{\sqrt{3}\sqrt{11}}$	$\frac{2\sqrt{3}}{\sqrt{5}\sqrt{11}}$	$-2\sqrt{3}\sqrt{11}$	$-4\times 3\sqrt{11}$	$-4\times 3\sqrt{11}$	$-2\sqrt{3}\sqrt{11}$	$\frac{2\sqrt{3}}{\sqrt{5}\sqrt{11}}$	$\frac{6\sqrt{2}}{\sqrt{3}\sqrt{11}}$	$2\times 17\sqrt{2}$	$2\times 9\sqrt{3}$	$2\sqrt{3}\sqrt{13}$
$-2\sqrt{11}\sqrt{13}$	$2\times 7\sqrt{11}$	$\frac{-6\sqrt{2}}{\sqrt{3}\sqrt{11}}$	$-2\times 7\sqrt{2}$	$2\times 5\sqrt{5}$	$2\times 3\times 7$	$4\times 3\sqrt{3}$	$-4\times 3\sqrt{3}$	$-2\times 3\times 7$	$-2\times 5\times\sqrt{5}$	$2\times 7\times\sqrt{2}$	$\frac{6\sqrt{2}}{\sqrt{3}\sqrt{11}}$	$2\times 7\sqrt{11}$	$2\sqrt{11}\sqrt{13}$
$\frac{\sqrt{2}\sqrt{5}}{\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$\frac{5\sqrt{2}}{\sqrt{5}\sqrt{11}}$	$\frac{2\sqrt{3}}{\sqrt{5}\sqrt{11}}$	$-2\times 5\sqrt{5}$	$-29\sqrt{2}$	$-3\sqrt{2}\sqrt{5}$	$\frac{2\times 3}{\sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{5}}$	$\frac{2\times 3}{\sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{5}}$	$-3\sqrt{2}\sqrt{5}$	$-29\sqrt{2}$	$-2\times 5\sqrt{5}$	$\frac{2\sqrt{3}}{\sqrt{5}\sqrt{11}}$	$\frac{5\sqrt{2}}{\sqrt{5}\sqrt{11}}$	$\frac{2\sqrt{5}}{\sqrt{11}\sqrt{13}}$
$\frac{-3\sqrt{2}}{\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$-9\sqrt{2}\sqrt{11}$	$2\sqrt{3}\sqrt{11}$	$2\times 3\times 7$	$3\sqrt{2}\sqrt{5}$	$-25\sqrt{2}$	$\frac{-2\times 5}{\sqrt{2}\sqrt{3}}$	$\frac{2\times 5}{\sqrt{2}\sqrt{3}}$	$25\sqrt{2}$	$-3\sqrt{2}\sqrt{5}$	$-2\times 3\times 7$	$-2\sqrt{3}\sqrt{11}$	$9\sqrt{2}\sqrt{11}$	$\frac{3\sqrt{2}}{\sqrt{11}\sqrt{13}}$
$\frac{2\sqrt{2}\sqrt{3}}{\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$\frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{3}\sqrt{11}}$	$-4\times 3\sqrt{11}$	$-4\times 3\sqrt{3}$	$\frac{2\times 3}{2\sqrt{3}\sqrt{5}}$	$\frac{2\times 5}{\sqrt{2}\sqrt{3}}$	$-4\times 5\sqrt{2}$	$-4\times 5\sqrt{2}$	$\frac{2\times 5}{\sqrt{2}\sqrt{3}}$	$\frac{2\times 3}{\sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{5}}$	$-4\times 3\sqrt{2}$	$-4\times 3\sqrt{11}$	$\frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{3}\sqrt{11}}$	$\frac{2\sqrt{2}\sqrt{3}}{\sqrt{11}\sqrt{13}}$
$\frac{-2\sqrt{2}\sqrt{3}}{\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$\frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{3}\sqrt{11}}$	$4\times 3\sqrt{11}$	$-4\times 3\sqrt{3}$	$\frac{-2\times 3}{\sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{5}}$	$\frac{2\times 5}{\sqrt{2}\sqrt{3}}$	$4\times 5\sqrt{2}$	$-4\times 5\sqrt{2}$	$\frac{-2\times 5}{\sqrt{2}\sqrt{3}}$	$\frac{2\times 3}{\sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{5}}$	$4\times 3\sqrt{3}$	$-4\times 3\sqrt{11}$	$\frac{-2\sqrt{2}}{\sqrt{3}\sqrt{11}}$	$\frac{2\sqrt{2}\sqrt{3}}{\sqrt{11}\sqrt{13}}$
$\frac{3\sqrt{2}}{\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$-9\sqrt{2}\sqrt{11}$	$-2\sqrt{3}\sqrt{11}$	$2\times 3\times 7$	$-3\sqrt{2}\sqrt{5}$	$-25\sqrt{2}$	$\frac{2\times 5}{\sqrt{2}\sqrt{3}}$	$\frac{2\times 5}{\sqrt{2}\sqrt{3}}$	$-25\sqrt{2}$	$-3\sqrt{2}\sqrt{5}$	$2\times 3\times 7$	$-2\sqrt{3}\sqrt{11}$	$-9\sqrt{2}\sqrt{11}$	$\frac{3\sqrt{2}}{\sqrt{11}\sqrt{13}}$
$\frac{-\sqrt{2}\sqrt{5}}{\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$\frac{5\sqrt{2}}{\sqrt{5}\sqrt{11}}$	$\frac{-2\sqrt{3}}{\sqrt{5}\sqrt{11}}$	$-2\times 5\sqrt{5}$	$29\sqrt{2}$	$-3\sqrt{2}\sqrt{5}$	$\frac{-2\times 3}{\sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{5}}$	$\frac{2\times 3}{\sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{5}}$	$3\sqrt{2}\sqrt{5}$	$-29\sqrt{2}$	$2\times 5\sqrt{5}$	$\frac{2\sqrt{3}}{\sqrt{5}\sqrt{11}}$	$\frac{-5\sqrt{2}}{\sqrt{5}\sqrt{11}}$	$\frac{\sqrt{2}\sqrt{5}}{\sqrt{11}\sqrt{13}}$
$2\sqrt{11}\sqrt{13}$	$2\times 7\sqrt{11}$	$\frac{6\sqrt{2}}{\sqrt{3}\sqrt{11}}$	$-2\times 7\sqrt{2}$	$-2\times 5\sqrt{5}$	$2\times 3\times 7$	$-4\times 3\sqrt{3}$	$-4\times 3\sqrt{3}$	$2\times 3\times 7$	$-2\times 5\sqrt{5}$	$-2\times 7\sqrt{2}$	$\frac{6\sqrt{2}}{\sqrt{3}\sqrt{11}}$	$-2\times 7\sqrt{11}$	$2\sqrt{11}\sqrt{13}$
$-2\sqrt{3}\sqrt{13}$	$2\times 9\sqrt{3}$	$-2\times 17\sqrt{2}$	$\frac{6\sqrt{2}}{\sqrt{3}\sqrt{11}}$	$\frac{-2\sqrt{3}}{\sqrt{5}\sqrt{11}}$	$-2\sqrt{3}\sqrt{11}$	$4\times 3\sqrt{11}$	$-4\times 3\sqrt{11}$	$2\sqrt{3}\sqrt{11}$	$\frac{2\sqrt{3}}{\sqrt{5}\sqrt{11}}$	$\frac{-6\sqrt{2}}{\sqrt{3}\sqrt{11}}$	$2\times 17\sqrt{2}$	$-2\times 9\sqrt{3}$	$2\sqrt{3}\sqrt{13}$
$\sqrt{2}\sqrt{13}$	$-11\sqrt{2}$	$2\times 9\sqrt{3}$	$-2\times 7\sqrt{11}$	$\frac{5\sqrt{2}}{\sqrt{5}\sqrt{11}}$	$-9\sqrt{2}\sqrt{11}$	$\frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{3}\sqrt{11}}$	$\frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{3}\sqrt{11}}$	$-9\sqrt{2}\sqrt{11}$	$\frac{5\sqrt{2}}{\sqrt{5}\sqrt{11}}$	$-2\times 7\sqrt{11}$	$2\times 9\sqrt{3}$	$-11\sqrt{2}$	$2\sqrt{13}$
$-\sqrt{2}$	$\sqrt{2}\sqrt{13}$	$-2\sqrt{3}\sqrt{13}$	$2\sqrt{11}\sqrt{13}$	$\frac{-\sqrt{2}\sqrt{5}}{\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$\frac{3\sqrt{2}}{\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$\frac{-2\sqrt{2}\sqrt{3}}{\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$\frac{2\sqrt{2}\sqrt{3}}{\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$\frac{-3\sqrt{2}}{\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$\frac{\sqrt{2}\sqrt{5}}{\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$-2\sqrt{11}\sqrt{13}$	$2\sqrt{3}\sqrt{13}$	$-\sqrt{2}\sqrt{13}$	$\sqrt{2}$

TABLEAU A3-2

Matrices de rotation : $d^{J}_{M',M}\left(\frac{\pi}{2}\right)$

J = 7

1	$\sqrt{2}\sqrt{7}$	$\sqrt{7}\sqrt{13}$	$2\sqrt{7}\sqrt{13}$	$\sqrt{7}\sqrt{11}\sqrt{13}$	$\frac{\sqrt{2}\sqrt{7}}{\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$\frac{\sqrt{3}\sqrt{7}}{\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$\frac{2\sqrt{2}\sqrt{3}}{\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$\frac{\sqrt{3}\sqrt{7}}{\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$\frac{\sqrt{2}\sqrt{7}}{\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$\sqrt{7}\sqrt{11}\sqrt{13}$	$2\sqrt{7}\sqrt{13}$	$\sqrt{7}\sqrt{13}$	$\sqrt{2}\sqrt{7}$	1
$-\sqrt{2}\sqrt{7}$	-4×3	$-5\sqrt{2}\sqrt{13}$	$-8\sqrt{2}\sqrt{13}$	$\frac{-3\sqrt{2}}{\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$-4\sqrt{11}\sqrt{13}$	$\frac{-\sqrt{2}\sqrt{3}}{\sqrt{11}\sqrt{13}}$	0	$\frac{\sqrt{2}\sqrt{3}}{\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$4\sqrt{11}\sqrt{13}$	$\frac{3\sqrt{2}}{\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$8\sqrt{2}\sqrt{13}$	$5\sqrt{2}\sqrt{13}$	4×3	$\sqrt{2}\sqrt{7}$
$\sqrt{7}\sqrt{13}$	$5\sqrt{2}\sqrt{13}$	43	2×25	$11\sqrt{11}$	$\sqrt{2}\sqrt{11}$	$-5\sqrt{3}\sqrt{11}$	$\frac{-2\sqrt{2}\sqrt{3}}{\sqrt{7}\sqrt{11}}$	$-5\sqrt{3}\sqrt{11}$	$\sqrt{2}\sqrt{11}$	$11\sqrt{11}$	2×25	43	$5\sqrt{2}\sqrt{13}$	$\sqrt{7}\sqrt{13}$
$-2\sqrt{7}\sqrt{13}$	$-8\sqrt{2}\sqrt{13}$	-2×25	-32	$2\sqrt{11}$	$8\sqrt{2}\sqrt{11}$	$\frac{2\times 3}{\sqrt{3}\sqrt{11}}$	0	$\frac{-2\times 3}{\sqrt{3}\sqrt{11}}$	$-8\sqrt{2}\sqrt{11}$	$-2\sqrt{11}$	32	2×25	$8\sqrt{2}\sqrt{13}$	$2\sqrt{7}\sqrt{13}$
$\sqrt{7}\sqrt{11}\sqrt{13}$	$3\sqrt{2}\sqrt{11}\sqrt{13}$	$11\sqrt{11}$	$-2\sqrt{11}$	-3×13	$-19\sqrt{2}$	$9\sqrt{3}$	$\frac{2\times 3}{\sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{7}}$	$9\sqrt{3}$	$-19\sqrt{2}$	-3×13	$-2\sqrt{11}$	$11\sqrt{11}$	$3\sqrt{2}\sqrt{11}\sqrt{13}$	$\sqrt{7}\sqrt{11}\sqrt{13}$
$\frac{-\sqrt{2}\sqrt{7}}{\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$-4\sqrt{11}\sqrt{13}$	$-\sqrt{2}\sqrt{11}$	$8\sqrt{2}\sqrt{11}$	$19\sqrt{2}$	-4×5	$\frac{-3\times 5}{\sqrt{2}\sqrt{3}}$	0	$\frac{3\times 5}{\sqrt{2}\sqrt{3}}$	4×5	$-19\sqrt{2}$	$-8\sqrt{2}\sqrt{11}$	$\sqrt{2}\sqrt{11}$	$4\sqrt{11}\sqrt{13}$	$\frac{\sqrt{2}\sqrt{7}}{\sqrt{11}\sqrt{13}}$
$\frac{\sqrt{3}\sqrt{7}}{\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$\frac{\sqrt{2}\sqrt{3}}{\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$-5\sqrt{3}\sqrt{11}$	$\frac{-2\times 3}{\sqrt{3}\sqrt{11}}$	$9\sqrt{3}$	$\frac{3\times 5}{\sqrt{2}\sqrt{3}}$	-5	$\frac{-2\times 5}{\sqrt{2}\sqrt{7}}$	-5	$\frac{3\times 5}{\sqrt{2}\sqrt{3}}$	$9\sqrt{3}$	$\frac{-2\times 3}{\sqrt{3}\sqrt{11}}$	$-5\sqrt{3}\sqrt{11}$	$\frac{\sqrt{2}\sqrt{3}}{\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$\frac{\sqrt{3}\sqrt{7}}{\sqrt{11}\sqrt{13}}$
$\frac{-2\sqrt{2}\sqrt{3}}{\sqrt{11}\sqrt{13}}$	0	$\frac{2\sqrt{2}\sqrt{3}}{\sqrt{7}\sqrt{11}}$	0	$\frac{2\times 3}{\sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{7}}$	0	$\frac{2\times 5}{\sqrt{2}\sqrt{7}}$	0	$\frac{-2\times 5}{\sqrt{2}\sqrt{7}}$	0	$\frac{2\times 3}{\sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{7}}$	0	$\frac{-2\sqrt{2}}{\sqrt{3}\sqrt{7}\sqrt{11}}$	0	$\frac{2\sqrt{2}\sqrt{3}}{\sqrt{11}\sqrt{13}}$
$\frac{\sqrt{3}\sqrt{7}}{\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$\frac{-\sqrt{2}\sqrt{3}}{\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$-5\sqrt{3}\sqrt{11}$	$\frac{2\times 3}{\sqrt{3}\sqrt{11}}$	$9\sqrt{3}$	$\frac{-3\times 5}{\sqrt{2}\sqrt{3}}$	-5	$\frac{2\times 5}{\sqrt{2}\sqrt{7}}$	-5	$\frac{-3\times 5}{\sqrt{2}\sqrt{3}}$	$9\sqrt{3}$	$\frac{2\times 3}{\sqrt{3}\sqrt{11}}$	$-5\sqrt{3}\sqrt{11}$	$\frac{-\sqrt{2}\sqrt{3}}{\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$\frac{\sqrt{3}\sqrt{7}}{\sqrt{11}\sqrt{13}}$
$\frac{-\sqrt{2}\sqrt{7}}{\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$4\sqrt{11}\sqrt{13}$	$-\sqrt{2}\sqrt{11}$	$-8\sqrt{2}\sqrt{11}$	$19\sqrt{2}$	4×5	$\frac{-3\times 5}{\sqrt{2}\sqrt{3}}$	0	$\frac{3\times 5}{\sqrt{2}\sqrt{3}}$	-4×5	$-19\sqrt{2}$	$8\sqrt{2}\sqrt{11}$	$\sqrt{2}\sqrt{11}$	$-4\sqrt{11}\sqrt{13}$	$\frac{\sqrt{2}\sqrt{7}}{\sqrt{11}\sqrt{13}}$
$\sqrt{7}\sqrt{11}\sqrt{13}$	$-3\sqrt{2}\sqrt{11}\sqrt{13}$	$11\sqrt{11}$	$2\sqrt{11}$	-3×13	$19\sqrt{2}$	$9\sqrt{3}$	$\frac{-2\times 3}{\sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{7}}$	$9\sqrt{3}$	$19\sqrt{2}$	-3×13	$2\sqrt{11}$	$11\sqrt{11}$	$-3\sqrt{2}\sqrt{11}\sqrt{13}$	$\sqrt{7}\sqrt{11}\sqrt{13}$
$-2\sqrt{7}\sqrt{13}$	$8\sqrt{2}\sqrt{13}$	-2×25	32	$2\sqrt{11}$	$-8\sqrt{2}\sqrt{11}$	$\frac{2\times 3}{\sqrt{3}\sqrt{11}}$	0	$\frac{-2\times 3}{\sqrt{3}\sqrt{11}}$	$8\sqrt{2}\sqrt{11}$	$-2\sqrt{11}$	-32	2×25	$-8\sqrt{2}\sqrt{13}$	$2\sqrt{7}\sqrt{13}$
$\sqrt{7}\sqrt{13}$	$-5\sqrt{2}\sqrt{13}$	43	-2×25	$11\sqrt{11}$	$-\sqrt{2}\sqrt{11}$	$-5\sqrt{3}\sqrt{11}$	$\frac{2\sqrt{2}\sqrt{3}}{\sqrt{7}\sqrt{11}}$	$-5\sqrt{3}\sqrt{11}$	$-\sqrt{2}\sqrt{11}$	$11\sqrt{11}$	-2×25	43	$-5\sqrt{2}\sqrt{13}$	$\sqrt{7}\sqrt{13}$
$-\sqrt{2}\sqrt{7}$	4×3	$-5\sqrt{2}\sqrt{13}$	$8\sqrt{2}\sqrt{13}$	$-3\sqrt{2}\sqrt{11}\sqrt{13}$	$4\sqrt{11}\sqrt{13}$	$\frac{-\sqrt{2}\sqrt{3}}{\sqrt{11}\sqrt{13}}$	0	$\frac{\sqrt{2}\sqrt{3}}{\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$-4\sqrt{11}\sqrt{13}$	$\frac{3\sqrt{2}}{\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$-8\sqrt{2}\sqrt{13}$	$5\sqrt{2}\sqrt{13}$	-4×3	$\sqrt{2}\sqrt{7}$
1	$-\sqrt{2}\sqrt{7}$	$\sqrt{7}\sqrt{13}$	$-2\sqrt{7}\sqrt{13}$	$\sqrt{7}\sqrt{11}\sqrt{13}$	$\frac{-\sqrt{2}\sqrt{7}}{\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$\frac{\sqrt{3}\sqrt{7}}{\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$\frac{-2\sqrt{2}\sqrt{3}}{\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$\frac{\sqrt{3}\sqrt{7}}{\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$\frac{-\sqrt{2}\sqrt{7}}{\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$\sqrt{7}\sqrt{11}\sqrt{13}$	$-2\sqrt{7}\sqrt{13}$	$\sqrt{7}\sqrt{13}$	$-\sqrt{2}\sqrt{7}$	1

$\frac{1}{2}$

TABLEAU A3-2

Matrices de rotation : $d^{J}_{M',M}\left(\frac{\pi}{2}\right)$

J = 15/2

$\sqrt{2}$	$\sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{5}$	$\frac{\sqrt{2}\sqrt{3}}{\sqrt{5}\sqrt{7}}$	$\frac{\sqrt{2}\sqrt{5}}{\sqrt{7}\sqrt{13}}$	$\frac{\sqrt{2}\sqrt{3}}{\sqrt{5}\sqrt{7}\sqrt{13}}$	$\frac{\sqrt{2}\sqrt{3}}{\sqrt{7}\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$\frac{\sqrt{2}\sqrt{5}}{\sqrt{7}\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$\frac{3\sqrt{2}\sqrt{5}}{\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$\frac{3\sqrt{2}\sqrt{5}}{\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$\frac{\sqrt{2}\sqrt{5}}{\sqrt{7}\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$\frac{\sqrt{2}\sqrt{3}}{\sqrt{7}\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$\frac{\sqrt{2}\sqrt{3}}{\sqrt{5}\sqrt{7}\sqrt{13}}$	$\frac{\sqrt{2}\sqrt{5}}{\sqrt{7}\sqrt{13}}$	$\frac{\sqrt{2}\sqrt{3}}{\sqrt{5}\sqrt{7}}$	$\sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{5}$	$\sqrt{2}$
$-\sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{5}$	$-13\sqrt{2}$	$-11\sqrt{2}\sqrt{7}$	$\frac{-3\sqrt{2}\sqrt{3}}{\sqrt{7}\sqrt{13}}$	$\frac{-7\sqrt{2}}{\sqrt{7}\sqrt{13}}$	$\frac{-\sqrt{2}\sqrt{5}}{\sqrt{7}\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$\frac{-\sqrt{2}\sqrt{3}}{\sqrt{7}\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$\frac{-\sqrt{2}\sqrt{3}}{\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$\frac{\sqrt{2}\sqrt{3}}{\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$\frac{\sqrt{2}\sqrt{3}}{\sqrt{7}\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$\frac{\sqrt{2}\sqrt{5}}{\sqrt{7}\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$\frac{7\sqrt{2}}{\sqrt{7}\sqrt{13}}$	$\frac{3\sqrt{2}\sqrt{3}}{\sqrt{7}\sqrt{13}}$	$11\sqrt{2}\sqrt{7}$	$13\sqrt{2}$	$\sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{5}$
$\frac{\sqrt{2}\sqrt{3}}{\sqrt{5}\sqrt{7}}$	$11\sqrt{2}\sqrt{7}$	$53\sqrt{2}$	$\frac{11\sqrt{2}}{\sqrt{3}\sqrt{13}}$	$17\sqrt{2}\sqrt{13}$	$\frac{-\sqrt{2}\sqrt{3}}{\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$\frac{-\sqrt{2}\sqrt{3}}{\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$\frac{-\sqrt{2}\sqrt{3}}{\sqrt{7}\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$\frac{-\sqrt{2}\sqrt{3}}{\sqrt{7}\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$\frac{-\sqrt{2}\sqrt{3}}{\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$\frac{\sqrt{2}\sqrt{5}}{\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$17\sqrt{2}\sqrt{13}$	$\frac{\sqrt{11}\sqrt{2}}{\sqrt{3}\sqrt{13}}$	$53\sqrt{2}$	$11\sqrt{2}\sqrt{7}$	$\frac{\sqrt{2}\sqrt{3}}{\sqrt{5}\sqrt{7}}$
$\frac{-\sqrt{2}\sqrt{5}}{\sqrt{7}\sqrt{13}}$	$\frac{-3\sqrt{2}\sqrt{3}}{\sqrt{7}\sqrt{13}}$	$\frac{-11\sqrt{2}}{\sqrt{3}\sqrt{13}}$	$-3\times 19\sqrt{2}$	$-7\sqrt{2}\sqrt{3}$	$\frac{3\sqrt{2}\sqrt{3}}{\sqrt{5}\sqrt{11}}$	$17\sqrt{2}\sqrt{11}$	$3\sqrt{2}\sqrt{7}\sqrt{11}$	$-3\sqrt{2}\sqrt{7}\sqrt{11}$	$-17\sqrt{2}\sqrt{11}$	$\frac{-3\sqrt{2}\sqrt{3}}{\sqrt{5}\sqrt{11}}$	$7\sqrt{2}\sqrt{3}$	$3\times 19\sqrt{2}$	$\frac{11\sqrt{2}}{\sqrt{3}\sqrt{13}}$	$\frac{3\sqrt{2}\sqrt{3}}{\sqrt{7}\sqrt{13}}$	$\frac{\sqrt{2}\sqrt{5}}{\sqrt{7}\sqrt{13}}$
$\frac{\sqrt{2}\sqrt{3}}{\sqrt{5}\sqrt{7}\sqrt{13}}$	$\frac{7\sqrt{2}}{\sqrt{7}\sqrt{13}}$	$17\sqrt{2}\sqrt{13}$	$7\sqrt{2}\sqrt{3}$	$-43\sqrt{2}$	$\frac{-7\sqrt{2}}{\sqrt{5}\sqrt{11}}$	$-\sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{11}$	$\frac{3\sqrt{2}}{\sqrt{3}\sqrt{7}\sqrt{11}}$	$\frac{3\sqrt{2}}{\sqrt{3}\sqrt{7}\sqrt{11}}$	$-\sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{11}$	$\frac{-7\sqrt{2}}{\sqrt{5}\sqrt{11}}$	$-43\sqrt{2}$	$7\sqrt{2}\sqrt{3}$	$17\sqrt{2}\sqrt{13}$	$\frac{7\sqrt{2}}{\sqrt{7}\sqrt{13}}$	$\frac{\sqrt{2}\sqrt{3}}{\sqrt{5}\sqrt{7}\sqrt{13}}$
$\frac{-\sqrt{2}\sqrt{3}}{\sqrt{7}\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$\frac{-\sqrt{2}\sqrt{5}}{\sqrt{7}\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$\frac{-\sqrt{2}\sqrt{5}}{\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$\frac{3\sqrt{2}\sqrt{3}}{\sqrt{5}\sqrt{11}}$	$\frac{7\sqrt{2}}{\sqrt{5}\sqrt{11}}$	$-\sqrt{2}$	$\frac{-13\sqrt{2}}{\sqrt{3}\sqrt{5}}$	$\frac{-3\sqrt{2}}{\sqrt{3}\sqrt{5}\sqrt{7}}$	$\frac{3\sqrt{2}}{\sqrt{3}\sqrt{5}\sqrt{7}}$	$\frac{13\sqrt{2}}{\sqrt{3}\sqrt{5}}$	$\sqrt{2}$	$\frac{-7\sqrt{2}}{\sqrt{5}\sqrt{11}}$	$\frac{-3\sqrt{2}\sqrt{3}}{\sqrt{5}\sqrt{11}}$	$\frac{\sqrt{2}\sqrt{5}}{\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$\frac{\sqrt{2}\sqrt{5}}{\sqrt{7}\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$\frac{\sqrt{2}\sqrt{3}}{\sqrt{7}\sqrt{11}\sqrt{13}}$
$\frac{\sqrt{2}\sqrt{5}}{\sqrt{7}\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$\frac{\sqrt{2}\sqrt{3}}{\sqrt{7}\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$\frac{-\sqrt{2}\sqrt{3}}{\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$-17\sqrt{2}\sqrt{11}$	$-\sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{11}$	$\frac{13\sqrt{2}}{\sqrt{3}\sqrt{5}}$	$25\sqrt{2}$	$\frac{-3\times 5}{\sqrt{2}\sqrt{7}}$	$\frac{-3\times 5}{\sqrt{2}\sqrt{7}}$	$25\sqrt{2}$	$\frac{13\sqrt{2}}{\sqrt{3}\sqrt{5}}$	$-\sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{11}$	$-17\sqrt{2}\sqrt{11}$	$\frac{-\sqrt{2}\sqrt{3}}{\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$\frac{\sqrt{2}\sqrt{3}}{\sqrt{7}\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$\frac{\sqrt{2}\sqrt{5}}{\sqrt{7}\sqrt{11}\sqrt{13}}$
$\frac{-3\sqrt{2}\sqrt{5}}{\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$\frac{-\sqrt{2}\sqrt{3}}{\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$\frac{\sqrt{2}\sqrt{3}}{\sqrt{7}\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$3\sqrt{2}\sqrt{7}\sqrt{11}$	$\frac{-3\sqrt{2}}{\sqrt{3}\sqrt{7}\sqrt{11}}$	$\frac{-3\sqrt{2}}{\sqrt{3}\sqrt{5}\sqrt{7}}$	$\frac{3\times 5}{\sqrt{2}\sqrt{7}}$	$35\sqrt{2}$	$-35\sqrt{2}$	$\frac{-3\times 5}{\sqrt{2}\sqrt{7}}$	$\frac{3\sqrt{2}}{\sqrt{3}\sqrt{5}\sqrt{7}}$	$\frac{3\sqrt{2}}{\sqrt{3}\sqrt{7}\sqrt{11}}$	$-3\sqrt{2}\sqrt{7}\sqrt{11}$	$\frac{-\sqrt{2}\sqrt{3}}{\sqrt{7}\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$\frac{\sqrt{2}\sqrt{3}}{\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$\frac{3\sqrt{2}\sqrt{5}}{\sqrt{11}\sqrt{13}}$
$\frac{3\sqrt{2}\sqrt{5}}{\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$\frac{-\sqrt{2}\sqrt{3}}{\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$\frac{-\sqrt{2}\sqrt{3}}{\sqrt{7}\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$3\sqrt{2}\sqrt{7}\sqrt{11}$	$\frac{3\sqrt{2}}{\sqrt{3}\sqrt{7}\sqrt{11}}$	$\frac{-3\sqrt{2}}{\sqrt{3}\sqrt{5}\sqrt{7}}$	$\frac{-3\times 5}{\sqrt{2}\sqrt{7}}$	$35\sqrt{2}$	$35\sqrt{2}$	$\frac{-3\times 5}{\sqrt{2}\sqrt{7}}$	$\frac{-3\sqrt{2}}{\sqrt{3}\sqrt{5}\sqrt{7}}$	$\frac{3\sqrt{2}}{\sqrt{3}\sqrt{7}\sqrt{11}}$	$3\sqrt{2}\sqrt{7}\sqrt{11}$	$\frac{-\sqrt{2}\sqrt{3}}{\sqrt{7}\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$\frac{-\sqrt{2}\sqrt{3}}{\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$\frac{3\sqrt{2}\sqrt{5}}{\sqrt{11}\sqrt{13}}$
$\frac{-\sqrt{2}\sqrt{5}}{\sqrt{7}\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$\frac{\sqrt{2}\sqrt{3}}{\sqrt{7}\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$\frac{\sqrt{2}\sqrt{3}}{\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$-17\sqrt{2}\sqrt{11}$	$\sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{11}$	$\frac{13\sqrt{2}}{\sqrt{3}\sqrt{5}}$	$-25\sqrt{2}$	$\frac{-3\times 5}{\sqrt{2}\sqrt{7}}$	$\frac{3\times 5}{\sqrt{2}\sqrt{7}}$	$25\sqrt{2}$	$\frac{-13\sqrt{2}}{\sqrt{3}\sqrt{5}}$	$-\sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{11}$	$17\sqrt{2}\sqrt{11}$	$\frac{-\sqrt{2}\sqrt{3}}{\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$\frac{-\sqrt{2}\sqrt{3}}{\sqrt{7}\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$\frac{\sqrt{2}\sqrt{5}}{\sqrt{7}\sqrt{11}\sqrt{13}}$
$\frac{\sqrt{2}\sqrt{3}}{\sqrt{7}\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$\frac{-\sqrt{2}\sqrt{5}}{\sqrt{7}\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$\frac{\sqrt{2}\sqrt{5}}{\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$\frac{3\sqrt{2}\sqrt{3}}{\sqrt{5}\sqrt{11}}$	$\frac{-7\sqrt{2}}{\sqrt{5}\sqrt{11}}$	$-\sqrt{2}$	$\frac{13\sqrt{2}}{\sqrt{3}\sqrt{5}}$	$\frac{-3\sqrt{2}}{\sqrt{3}\sqrt{5}\sqrt{7}}$	$\frac{-3\sqrt{2}}{\sqrt{3}\sqrt{5}\sqrt{7}}$	$\frac{13\sqrt{2}}{\sqrt{3}\sqrt{5}}$	$-\sqrt{2}$	$\frac{-7\sqrt{2}}{\sqrt{5}\sqrt{11}}$	$\frac{3\sqrt{2}\sqrt{3}}{\sqrt{5}\sqrt{11}}$	$\frac{\sqrt{2}\sqrt{5}}{\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$\frac{-\sqrt{2}\sqrt{5}}{\sqrt{7}\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$\frac{\sqrt{2}\sqrt{3}}{\sqrt{5}\sqrt{7}\sqrt{13}}$
$\frac{-\sqrt{2}\sqrt{3}}{\sqrt{5}\sqrt{7}\sqrt{13}}$	$\frac{7\sqrt{2}}{\sqrt{7}\sqrt{13}}$	$-17\sqrt{2}\sqrt{13}$	$7\sqrt{2}\sqrt{3}$	$43\sqrt{2}$	$\frac{-7\sqrt{2}}{\sqrt{5}\sqrt{11}}$	$\sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{11}$	$\frac{3\sqrt{2}}{\sqrt{3}\sqrt{7}\sqrt{11}}$	$\frac{-3\sqrt{2}}{\sqrt{3}\sqrt{7}\sqrt{11}}$	$-\sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{11}$	$\frac{7\sqrt{2}}{\sqrt{5}\sqrt{11}}$	$-43\sqrt{2}$	$-7\sqrt{2}\sqrt{3}$	$17\sqrt{2}\sqrt{13}$	$\frac{-7\sqrt{2}}{\sqrt{7}\sqrt{13}}$	$\frac{\sqrt{2}\sqrt{3}}{\sqrt{5}\sqrt{7}\sqrt{13}}$
$\frac{\sqrt{2}\sqrt{5}}{\sqrt{7}\sqrt{13}}$	$\frac{-3\sqrt{2}\sqrt{3}}{\sqrt{7}\sqrt{13}}$	$\frac{11\sqrt{2}}{\sqrt{3}\sqrt{13}}$	$-3\times 19\sqrt{2}$	$7\sqrt{2}\sqrt{3}$	$\frac{3\sqrt{2}\sqrt{3}}{\sqrt{5}\sqrt{11}}$	$-17\sqrt{2}\sqrt{11}$	$3\sqrt{2}\sqrt{7}\sqrt{11}$	$3\sqrt{2}\sqrt{7}\sqrt{11}$	$-17\sqrt{2}\sqrt{11}$	$\frac{3\sqrt{2}\sqrt{3}}{\sqrt{5}\sqrt{11}}$	$7\sqrt{2}\sqrt{3}$	$-3\times 19\sqrt{2}$	$\frac{11\sqrt{2}}{\sqrt{3}\sqrt{13}}$	$\frac{-3\sqrt{2}\sqrt{3}}{\sqrt{7}\sqrt{13}}$	$\frac{\sqrt{2}\sqrt{5}}{\sqrt{7}\sqrt{13}}$
$\frac{-\sqrt{2}\sqrt{3}}{\sqrt{5}\sqrt{7}}$	$11\sqrt{2}\sqrt{7}$	$-53\sqrt{2}$	$\frac{11\sqrt{2}}{\sqrt{3}\sqrt{13}}$	$-17\sqrt{2}\sqrt{13}$	$\frac{\sqrt{2}\sqrt{5}}{\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$\frac{\sqrt{2}\sqrt{3}}{\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$\frac{-\sqrt{2}\sqrt{3}}{\sqrt{7}\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$\frac{\sqrt{2}\sqrt{3}}{\sqrt{7}\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$\frac{-\sqrt{2}\sqrt{3}}{\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$\frac{-\sqrt{2}\sqrt{5}}{\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$17\sqrt{2}\sqrt{13}$	$\frac{-11\sqrt{2}}{\sqrt{3}\sqrt{13}}$	$53\sqrt{2}$	$11\sqrt{2}\sqrt{7}$	$\frac{\sqrt{2}\sqrt{3}}{\sqrt{5}\sqrt{7}}$
$\sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{5}$	$-13\sqrt{2}$	$11\sqrt{2}\sqrt{7}$	$\frac{-3\sqrt{2}\sqrt{3}}{\sqrt{7}\sqrt{13}}$	$\frac{7\sqrt{2}}{\sqrt{7}\sqrt{13}}$	$\frac{-\sqrt{2}\sqrt{5}}{\sqrt{7}\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$\frac{\sqrt{2}\sqrt{3}}{\sqrt{7}\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$\frac{-\sqrt{2}\sqrt{3}}{\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$\frac{-\sqrt{2}\sqrt{3}}{\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$\frac{\sqrt{2}\sqrt{3}}{\sqrt{7}\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$\frac{-\sqrt{2}\sqrt{5}}{\sqrt{7}\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$\frac{7\sqrt{2}}{\sqrt{7}\sqrt{13}}$	$\frac{-3\sqrt{2}\sqrt{3}}{\sqrt{7}\sqrt{13}}$	$-11\sqrt{2}\sqrt{7}$	$-13\sqrt{2}$	$\sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{5}$
$-\sqrt{2}$	$\sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{5}$	$\frac{-\sqrt{2}\sqrt{3}}{\sqrt{5}\sqrt{7}}$	$\frac{\sqrt{2}\sqrt{5}}{\sqrt{7}\sqrt{13}}$	$\frac{-\sqrt{2}\sqrt{3}}{\sqrt{5}\sqrt{7}\sqrt{13}}$	$\frac{\sqrt{2}\sqrt{3}}{\sqrt{7}\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$\frac{-\sqrt{2}\sqrt{5}}{\sqrt{7}\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$\frac{3\sqrt{2}\sqrt{5}}{\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$\frac{-3\sqrt{2}\sqrt{5}}{\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$\frac{\sqrt{2}\sqrt{5}}{\sqrt{7}\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$\frac{-\sqrt{2}\sqrt{3}}{\sqrt{7}\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$\frac{\sqrt{2}\sqrt{3}}{\sqrt{5}\sqrt{7}\sqrt{13}}$	$\frac{-\sqrt{2}\sqrt{5}}{\sqrt{7}\sqrt{13}}$	$\frac{\sqrt{2}\sqrt{3}}{\sqrt{5}\sqrt{7}}$	$-\sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{5}$	$\sqrt{2}$

TABLEAU A3-2

Matrices de rotation : $d^{J}_{M',M}\left(\frac{\pi}{2}\right)$

J = 8

$\frac{1}{2^8}$

1	4	$2\sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{5}$	$4\sqrt{5}\sqrt{7}$	$\frac{2\sqrt{3}}{\sqrt{7}\sqrt{13}}$	$\frac{4\sqrt{3}}{\sqrt{7}\sqrt{13}}$	$\frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{7}\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$\frac{4\sqrt{5}}{\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$\frac{3\sqrt{2}}{\sqrt{5}\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$\frac{4\sqrt{3}}{\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$\frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{7}\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$\frac{4\sqrt{3}}{\sqrt{7}\sqrt{13}}$	$\frac{2\sqrt{5}}{\sqrt{7}\sqrt{13}}$	$4\sqrt{5}\sqrt{7}$	$\frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{3}\sqrt{5}}$	4	1
-4	-2×7	$\frac{-2\times 3}{\sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{5}}$	$\frac{-2\times 5}{\sqrt{5}\sqrt{7}}$	$\frac{-4\sqrt{5}}{\sqrt{7}\sqrt{13}}$	$\frac{-6\sqrt{3}}{\sqrt{7}\sqrt{13}}$	$\frac{-2\sqrt{2}}{\sqrt{7}\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$\frac{-2\sqrt{5}}{\sqrt{11}\sqrt{13}}$	0	$\frac{2\sqrt{5}}{\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$\frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{7}\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$\frac{6\sqrt{3}}{\sqrt{7}\sqrt{13}}$	$\frac{4\sqrt{5}}{\sqrt{7}\sqrt{13}}$	$\frac{2\times 5}{\sqrt{3}\sqrt{7}}$	$\frac{2\times 3}{\sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{5}}$	2×7	4
$\frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{3}\sqrt{5}}$	$\frac{2\times 3}{\sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{5}}$	$6\cdot 4$	$\frac{2\times 7}{\sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{7}}$	$\frac{4\sqrt{2}}{\sqrt{3}\sqrt{7}\sqrt{13}}$	$\frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{5}\sqrt{7}\sqrt{13}}$	0	$\frac{-2\sqrt{2}}{\sqrt{3}\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$\frac{-4\sqrt{3}}{\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$\frac{-2\sqrt{2}}{\sqrt{3}\sqrt{11}\sqrt{13}}$	0	$\frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{5}\sqrt{7}\sqrt{13}}$	$\frac{4\sqrt{2}}{\sqrt{3}\sqrt{7}\sqrt{13}}$	$\frac{2\times 7}{\sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{7}}$	64	$\frac{2\times 3}{\sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{5}}$	$\frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{3}\sqrt{5}}$
$-4\sqrt{3}\sqrt{7}$	$\frac{-2\times 5}{\sqrt{5}\sqrt{7}}$	$\frac{-2\times 7}{\sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{7}}$	$-2\times 5\times 9$	$-4\times 3\sqrt{13}$	$\frac{2\sqrt{3}}{\sqrt{5}\sqrt{13}}$	$\frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{5}\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$\frac{2\sqrt{7}}{\sqrt{11}\sqrt{13}}$	0	$\frac{-2\sqrt{7}}{\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$\frac{-2\sqrt{2}}{\sqrt{5}\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$\frac{-2\sqrt{3}}{\sqrt{5}\sqrt{13}}$	$4\times 3\sqrt{13}$	$2\times 5\times 9$	$\frac{2\times 7}{\sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{7}}$	$\frac{2\times 5}{\sqrt{5}\sqrt{7}}$	$4\sqrt{3}\sqrt{7}$
$\frac{2\sqrt{3}}{\sqrt{7}\sqrt{13}}$	$\frac{4\sqrt{3}}{\sqrt{7}\sqrt{13}}$	$\frac{4\sqrt{2}}{\sqrt{3}\sqrt{7}\sqrt{13}}$	$4\times 3\sqrt{13}$	-4×9	$-4\times 5\sqrt{3}\sqrt{5}$	$-4\sqrt{2}\sqrt{5}\sqrt{11}$	$4\sqrt{7}\sqrt{11}$	$6\sqrt{2}\sqrt{7}\sqrt{11}$	$4\sqrt{7}\sqrt{11}$	$-4\sqrt{2}\sqrt{5}\sqrt{11}$	$-4\times 5\sqrt{3}\sqrt{5}$	-4×9	$4\times 3\sqrt{13}$	$\frac{4\sqrt{2}}{\sqrt{3}\sqrt{7}\sqrt{13}}$	$\frac{4\sqrt{5}}{\sqrt{7}\sqrt{13}}$	$\frac{2\sqrt{5}}{\sqrt{7}\sqrt{13}}$
$\frac{-4\sqrt{3}}{\sqrt{7}\sqrt{13}}$	$\frac{-6\sqrt{3}}{\sqrt{7}\sqrt{13}}$	$\frac{-2\sqrt{2}}{\sqrt{5}\sqrt{7}\sqrt{13}}$	$\frac{2\sqrt{3}}{\sqrt{5}\sqrt{13}}$	$4\times 5\sqrt{3}\sqrt{5}$	2×17	$\frac{-2\times 3}{\sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{11}}$	$\frac{-2\sqrt{3}}{\sqrt{5}\sqrt{7}\sqrt{11}}$	0	$\frac{2\sqrt{3}}{\sqrt{5}\sqrt{7}\sqrt{11}}$	$\frac{2\times 3}{\sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{11}}$	-2×17	$-4\times 5\sqrt{3}\sqrt{5}$	$\frac{-2\sqrt{3}}{\sqrt{5}\sqrt{13}}$	$\frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{3}\sqrt{7}\sqrt{13}}$	$\frac{6\sqrt{3}}{\sqrt{7}\sqrt{13}}$	$\frac{4\sqrt{3}}{\sqrt{7}\sqrt{13}}$
$\frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{7}\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$\frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{7}\sqrt{11}\sqrt{13}}$	0	$\frac{-2\sqrt{2}}{\sqrt{5}\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$-4\sqrt{2}\sqrt{5}\sqrt{11}$	$\frac{2\times 3}{\sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{11}}$	64	$\frac{-2\times 3}{\sqrt{5}\sqrt{7}}$	$\frac{-4\times 3}{\sqrt{5}\sqrt{7}}$	$\frac{-2\sqrt{2}}{\sqrt{5}\sqrt{7}}$	64	$\frac{2\times 3}{\sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{11}}$	$-4\sqrt{2}\sqrt{5}\sqrt{11}$	$\frac{-2\sqrt{2}}{\sqrt{5}\sqrt{11}\sqrt{13}}$	0	$\frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{7}\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$\frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{7}\sqrt{11}\sqrt{13}}$
$\frac{-4\sqrt{3}}{\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$\frac{-2\sqrt{3}}{\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$\frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{3}\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$\frac{2\sqrt{7}}{\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$-4\sqrt{7}\sqrt{11}$	$\frac{-2\sqrt{3}}{\sqrt{5}\sqrt{7}\sqrt{11}}$	$\frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{5}\sqrt{7}}$	$2\times 5\times 7$	0	$-2\times 5\times 7$	$\frac{-2\sqrt{2}}{\sqrt{5}\sqrt{7}}$	$\frac{2\sqrt{3}}{\sqrt{5}\sqrt{7}\sqrt{11}}$	$4\sqrt{7}\sqrt{11}$	$\frac{-2\sqrt{7}}{\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$\frac{-2\sqrt{2}}{\sqrt{3}\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$\frac{2\sqrt{5}}{\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$\frac{4\sqrt{3}}{\sqrt{11}\sqrt{13}}$
$\frac{4\sqrt{2}}{\sqrt{5}\sqrt{11}\sqrt{13}}$	0	$\frac{-4\sqrt{3}}{\sqrt{11}\sqrt{13}}$	0	$6\sqrt{2}\sqrt{7}\sqrt{11}$	0	$\frac{-4\times 3}{\sqrt{5}\sqrt{7}}$	0	$2\times 5\times 7$	0	$\frac{-4\times 3}{\sqrt{5}\sqrt{7}}$	0	$6\sqrt{2}\sqrt{7}\sqrt{11}$	0	$\frac{-4\sqrt{3}}{\sqrt{11}\sqrt{13}}$	0	$\frac{4\sqrt{2}}{\sqrt{5}\sqrt{11}\sqrt{13}}$
$\frac{-4\sqrt{3}}{\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$\frac{2\sqrt{5}}{\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$\frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{3}\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$\frac{-2\sqrt{7}}{\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$-4\sqrt{7}\sqrt{11}$	$\frac{2\sqrt{3}}{\sqrt{5}\sqrt{7}\sqrt{11}}$	$\frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{5}\sqrt{7}}$	$-2\times 5\times 7$	0	$2\times 5\times 7$	$\frac{-2\sqrt{2}}{\sqrt{5}\sqrt{7}}$	$\frac{-2\sqrt{3}}{\sqrt{5}\sqrt{7}\sqrt{11}}$	$4\sqrt{7}\sqrt{11}$	$\frac{2\sqrt{7}}{\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$\frac{-2\sqrt{2}}{\sqrt{3}\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$\frac{-2\sqrt{5}}{\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$\frac{4\sqrt{3}}{\sqrt{11}\sqrt{13}}$
$\frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{7}\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$\frac{-2\sqrt{2}}{\sqrt{7}\sqrt{11}\sqrt{13}}$	0	$\frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{5}\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$-4\sqrt{2}\sqrt{5}\sqrt{11}$	$\frac{-2\times 3}{\sqrt{2}\sqrt{7}\sqrt{11}}$	64	$\frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{5}\sqrt{7}}$	$\frac{-4\times 3}{\sqrt{3}\sqrt{7}}$	$\frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{5}\sqrt{7}}$	64	$\frac{-2\times 3}{\sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{11}}$	$-4\sqrt{2}\sqrt{5}\sqrt{11}$	$\frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{5}\sqrt{11}\sqrt{13}}$	0	$\frac{-2\sqrt{3}}{\sqrt{7}\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$\frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{7}\sqrt{11}\sqrt{13}}$
$\frac{-4\sqrt{3}}{\sqrt{5}\sqrt{13}}$	$\frac{6\sqrt{3}}{\sqrt{7}\sqrt{13}}$	$\frac{-2\sqrt{2}}{\sqrt{5}\sqrt{7}\sqrt{13}}$	$\frac{-2\sqrt{3}}{\sqrt{5}\sqrt{13}}$	$4\times 5\sqrt{3}\sqrt{5}$	-2×17	$\frac{-2\times 3}{\sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{11}}$	$\frac{2\sqrt{3}}{\sqrt{5}\sqrt{7}\sqrt{11}}$	0	$\frac{-2\sqrt{3}}{\sqrt{5}\sqrt{7}\sqrt{11}}$	$\frac{2\times 3}{\sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{11}}$	2×17	$-4\times 5\sqrt{3}\sqrt{5}$	$\frac{2\sqrt{3}}{\sqrt{5}\sqrt{13}}$	$\frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{5}\sqrt{7}\sqrt{13}}$	$\frac{-6\sqrt{3}}{\sqrt{7}\sqrt{13}}$	$\frac{4\sqrt{3}}{\sqrt{7}\sqrt{13}}$
$\frac{2\sqrt{5}}{\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$\frac{-4\sqrt{5}}{\sqrt{7}\sqrt{13}}$	$\frac{4\sqrt{2}}{\sqrt{3}\sqrt{7}\sqrt{13}}$	$-4\times 3\sqrt{13}$	-4×9	$4\times 5\sqrt{3}\sqrt{5}$	$-4\sqrt{2}\sqrt{5}\sqrt{11}$	$-4\sqrt{7}\sqrt{11}$	$6\sqrt{2}\sqrt{7}\sqrt{11}$	$-4\sqrt{7}\sqrt{11}$	$-4\sqrt{2}\sqrt{5}\sqrt{11}$	$4\times 5\sqrt{3}\sqrt{5}$	-4×9	$-4\times 3\sqrt{13}$	$\frac{4\sqrt{2}}{\sqrt{3}\sqrt{7}\sqrt{13}}$	$\frac{-4\sqrt{3}}{\sqrt{7}\sqrt{13}}$	$\frac{2\sqrt{3}}{\sqrt{7}\sqrt{13}}$
$-4\sqrt{3}\sqrt{7}$	$\frac{2\times 5}{\sqrt{5}\sqrt{7}}$	$\frac{-2\times 7}{\sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{7}}$	$2\times 5\times 9$	$-4\times 3\sqrt{13}$	$\frac{-2\sqrt{3}}{\sqrt{5}\sqrt{13}}$	$\frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{5}\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$\frac{-2\sqrt{7}}{\sqrt{11}\sqrt{13}}$	0	$\frac{2\sqrt{7}}{\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$\frac{-2\sqrt{2}}{\sqrt{5}\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$\frac{2\sqrt{3}}{\sqrt{5}\sqrt{13}}$	$4\times 3\sqrt{13}$	$-2\times 5\times 9$	$\frac{2\times 7}{\sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{7}}$	$\frac{-2\times 5}{\sqrt{5}\sqrt{7}}$	$4\sqrt{5}\sqrt{7}$
$\frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{3}\sqrt{5}}$	$\frac{-2\times 3}{\sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{5}}$	64	$\frac{-2\times 7}{\sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{7}}$	$\frac{4\sqrt{2}}{\sqrt{3}\sqrt{7}\sqrt{13}}$	$\frac{-2\sqrt{2}}{\sqrt{5}\sqrt{7}\sqrt{13}}$	0	$\frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{3}\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$\frac{-4\sqrt{3}}{\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$\frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{3}\sqrt{11}\sqrt{13}}$	0	$\frac{-2\sqrt{2}}{\sqrt{5}\sqrt{7}\sqrt{13}}$	$\frac{4\sqrt{2}}{\sqrt{3}\sqrt{7}\sqrt{13}}$	$\frac{-2\times 7}{\sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{7}}$	64	$\frac{-2\times 3}{\sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{5}}$	$\frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{3}\sqrt{5}}$
-4	2×7	$\frac{-2\times 3}{\sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{5}}$	$\frac{2\times 5}{\sqrt{5}\sqrt{7}}$	$\frac{-4\sqrt{5}}{\sqrt{7}\sqrt{13}}$	$\frac{6\sqrt{3}}{\sqrt{7}\sqrt{13}}$	$\frac{-2\sqrt{2}}{\sqrt{7}\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$\frac{2\sqrt{5}}{\sqrt{11}\sqrt{13}}$	0	$\frac{-2\sqrt{5}}{\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$\frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{7}\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$\frac{-6\sqrt{3}}{\sqrt{7}\sqrt{13}}$	$\frac{4\sqrt{5}}{\sqrt{7}\sqrt{13}}$	$\frac{-2\times 5}{\sqrt{3}\sqrt{7}}$	$\frac{2\times 3}{\sqrt{2}\sqrt{3}\sqrt{5}}$	-2×7	4
1	-4	$\frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{3}\sqrt{5}}$	$-4\sqrt{5}\sqrt{7}$	$\frac{2\sqrt{3}}{\sqrt{7}\sqrt{13}}$	$\frac{-4\sqrt{3}}{\sqrt{7}\sqrt{13}}$	$\frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{7}\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$\frac{-4\sqrt{5}}{\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$\frac{3\sqrt{2}}{\sqrt{5}\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$\frac{-4\sqrt{5}}{\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$\frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{7}\sqrt{11}\sqrt{13}}$	$\frac{-4\sqrt{3}}{\sqrt{7}\sqrt{13}}$	$\frac{2\sqrt{5}}{\sqrt{7}\sqrt{13}}$	$-4\sqrt{5}\sqrt{7}$	$\frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{3}\sqrt{5}}$	-4	1

TABLEAU A3-3

Formation de fonctions de base des représentations irréductibles des groupes du cube 0 et 0^+.

(k et k' sont des entiers).

Rep.	Type	Fonctions $\simeq \sum_g P^{i}_{ii}(g) \mid JM >$	M	M'	J
Γ_1	1	$\sum_{M'} \left\{ 4\delta_{M',M} + (-)^{J} 4\delta_{M',-M} + 16\, d^{J}_{M',M}\left(\frac{\pi}{2}\right) \right\} \mid JM' >$	4 k	M + 4k'	entier
Γ_2	x y z	$\sum_{M'} \left\{ 4\delta_{M',M} + (-)^{J} 4\delta_{M',-M} - 16\, d^{J}_{M',M}\left(\frac{\pi}{2}\right) \right\} \mid JM' >$	4 k + 2	M + 4k'	"
Γ_3	$z^2 - \frac{1}{2}(x^2 + y^2)$	$\sum_{M'} \left\{ 4\delta_{M',M} + (-)^{J} 4\delta_{M',-M} - 8\, d^{J}_{M',M}\left(\frac{\pi}{2}\right) \right\} \mid JM' >$	4 k	M + 4k'	"
	$x^2 - y^2$	$\sum_{M'} \left\{ 4\delta_{M',M} + (-)^{J} 4\delta_{M',-M} + 8\, d^{J}_{M',M}\left(\frac{\pi}{2}\right) \right\} \mid JM' >$	4 k + 2	M + 4k'	
	z	$\sum_{M'} \left\{ 4\delta_{M',M} - (-)^{J} 4\delta_{M',-M} \right\} \mid JM' >$	4 k	M + 4k'	
Γ_4	x	$\sum_{M'} \left\{ 2\delta_{M',M} + (-)^{J} 2\delta_{M',-M} + (-)^{\frac{M'-M}{2}} 4\, d^{J}_{M',M}\left(\frac{\pi}{2}\right) \right\} \mid JM' >$	2 k + 1	M + 2k'	"
	y	$\sum_{M'} \left\{ 2\delta_{M',M} - (-)^{J} 2\delta_{M',-M} + 4\, d^{J}_{M',M}\left(\frac{\pi}{2}\right) \right\} \mid JM' >$	2 k + 1	M + 2k'	
	xy	$\sum_{M'} \left\{ 4\delta_{M',M} + (-)^{J} 4\delta_{M',-M} + (-)^{J} 4\, d^{J}_{M',M}\left(\frac{\pi}{2}\right) \right\} \mid JM' >$	4 k + 2	M + 4k'	
Γ_5	yz	$\sum_{M'} \left\{ 2\delta_{M',M} + (-)^{J} 2\delta_{M',-M} - (-)^{\frac{M'-M}{2}} 4\, d^{J}_{M',M}\left(\frac{\pi}{2}\right) \right\} \mid JM' >$	2 k + 1	M + 2 k'	"
	zx	$\sum_{M'} \left\{ 2\delta_{M',M} - (-)^{J} 2\delta_{M',-M} - 4\, d^{J}_{M',M}\left(\frac{\pi}{2}\right) \right\} \mid JM' >$	2 k + 1	M + 2 k'	
Γ_6	$\mid + >$	$\sum_{M'} \left\{ 4\delta_{M',M} + 8\sqrt{2}\, d_{M',M}\left(\frac{\pi}{2}\right) \right\} \mid JM' >$	4 k + 1/2	M + 4 k'	$\frac{1}{2}$ entier
	$\mid - >$		4 k + 7/2	M + 4 k'	
Γ_7	$xyz \mid + >$	$\sum_{M'} \left\{ 4\delta_{M',M} - 8\sqrt{2}\, d^{J}_{M',M}\left(\frac{\pi}{2}\right) \right\} \mid JM' >$	4 k + 5/2	M + 4 k'	"
	$xyz \mid - >$		4 k + 3/2	M + 4 k'	
Γ_8	$\left\mid \frac{3}{2} + \frac{3}{2} \right>$	$\sum_{M'} \left\{ 4\delta_{M',M} + 4\sqrt{2}\, d^{J}_{M',M}\left(\frac{\pi}{2}\right) \right\} \mid JM' >$	4 k + 3/2	M + 4 k'	"
	$\left\mid \frac{3}{2} - \frac{3}{2} \right>$		4 k + 5/2	M + 4 k'	
	$\left\mid \frac{3}{2} + \frac{1}{2} \right>$	$\sum_{M'} \left\{ 4\delta_{M',M} - 4\sqrt{2}\, d^{J}_{M',M}\left(\frac{\pi}{2}\right) \right\} \mid JM' >$	4 k + 1/2	M + 4 k'	
	$\left\mid \frac{3}{2} - \frac{1}{2} \right>$		4 k + 7/2	M + 4 k'	

APPENDICE IV

EQUIVALENCES OPÉRATORIELLES

Considérons un opérateur $\mathcal{O}$ agissant dans une multiplicité $2J + 1$ et que, pour simplifier, nous choisirons hermitique.

Cette restriction n'est pas limitative. Nous allons chercher pour $\mathcal{O}$, dans cette multiplicité, un opérateur équivalent sous forme d'un développement en puissances successives des composantes de J [1]. Remarquons que toute composante de J élevée à la puissance $2J + p$ avec $p > 0$ est équivalente à un polynôme de degré au plus égal à $2J$ en les composantes de J. Il s'ensuit que l'opérateur $\mathcal{O}$ pourra être écrit sous la forme :

$$\mathcal{O} \simeq \sum_{k=o}^{2J} (J_+^k F_k(J_z) + F_k(J_z) J_-^k) \qquad \text{(IV-a)}$$

où $F_k(J_z)$ est un polynôme en J_z de degré $2J-k$.

La forme (IV-a) est bien hermitique comme l'opérateur $\mathcal{O}$. Elle a des éléments de matrice entre tous les états $|JM>$ de la multiplicité $2J + 1$. Le nombre de coefficients entrant dans le développement (IV-a) est :

$$\sum_{k=o}^{2J} (2J - k + 1) = (J + 1)(2J + 1)$$

C'est le nombre d'éléments de matrice différents de l'opérateur $\mathcal{O}$ dans cette multiplicité. Si l'on connaît ces derniers, il sera facile de déterminer les coefficients de $F_k(J_z)$. En effet nous considérons par exemple le terme :

$$J_+^k F_k(J_z) ,$$

il n'a d'éléments de matrice qu'entre $|JM>$ et $|JM + k>$.

On aura donc au total $2J - k + 1$ équations reliant les coefficients de $F_k(J_z)$ et les éléments de matrice de $\mathcal{O}$ existants.

Posons :

$$u_p = \frac{< JM_p + k | \mathcal{O} | JM_p >}{< JM_p + k | J_+^k | JM_p >} \qquad \begin{matrix} (p = 0, 1, \ldots r \\ r = 2J - k + 1) \end{matrix}$$

On aura :

$$u_p = x_o + \alpha_p x_1 + \ldots + \alpha_p^r x_r \qquad (p = 0, 1, \ldots r) \qquad \text{(IV-b)}$$

Equation où les x_i sont les coefficients de $F_k(J_z)$ et où les α_p représentent les valeurs de J_z.

Nous avons donc à résoudre le système d'équations linéaires simultanées (IV-b). Il est clair que :

---

(1) Tout ce qui va suivre pourrait être écrit dans le langage des opérateurs tensoriels irréductibles.

$$x_i = \frac{\begin{vmatrix} 1 & \alpha_r & \alpha_r^2 & \dots & \alpha_r^{i-1} & u_r & \alpha_r^{i+1} & \dots & \alpha_r^r \\ \vdots & & & & & & & & \\ 1 & \alpha_o & \alpha_o^2 & \dots & \alpha_o^{i-1} & u_o & \alpha_o^{i+1} & \dots & \alpha_o^r \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} 1 & \alpha_r & \alpha_r^2 & \dots & & & & & \alpha_r^r \\ \vdots & & & & & & & & \\ 1 & \alpha_o & \alpha_o^2 & \dots & & & & & \alpha_o^r \end{vmatrix}}$$

Le dénominateur est un déterminant de Van der Monde dont la valeur est :

$$\prod_{\substack{i>j \\ i\neq j}} (\alpha_i - \alpha_j)$$

Le calcul du numérateur est un peu plus compliqué. Développons ce déterminant par rapport à la colonne des u. Le facteur de u_p sera au signe près :

$$\begin{vmatrix} 1 & \alpha_r & \dots & \alpha_r^{i-1} & \alpha_r^{i+1} & \dots & \alpha_r^r \\ \vdots & & & & & & \\ 1 & \alpha_{p+1} & \dots & \alpha_{p+1}^{i-1} & \alpha_{p+1}^{i+1} & \dots & \alpha_{p+1}^r \\ 1 & \alpha_{p-1} & \dots & \alpha_{p-1}^{i-1} & \alpha_{p-1}^{i+1} & \dots & \alpha_{p-1}^r \\ \vdots & & & & & & \\ 1 & \alpha_o & \dots & \alpha_o^{i-1} & \alpha_o^{i+1} & \dots & \alpha_o^r \end{vmatrix}$$

Ce nouveau déterminant porte le nom de "circulant" car il est nul pour toute égalisation de α_q avec α_s et change de signe pour tout échange de deux des α_s. C'est donc un polynôme homogène de degré $\frac{r(r+1)}{2} - i$ qui pourra être écrit sous la forme :

$$P_{(r-i)} \prod_{\substack{k>l \\ k,l\neq p}} (\alpha_k - \alpha_l)$$

où $P_{(r-i)}$ est un polynôme de degré r-i, homogène, symétrique en $\alpha_o \dots \alpha_r$ (α_p exclus). Ce polynôme pourrait éventuellement être mis sous la forme d'un déterminant (1). Il a reçu le nom de bialternant. La simplicité de celui que nous avons à considérer nous incite à tenter le calcul direct. Cherchons les termes de plus haut degré en α_s (s quelconque). Ce degré maximal est bien évidemment r. Il est clair que $\Pi(\alpha_k - \alpha_l)$ fournit des termes de degré maximal r-i pour chacun des α_s. Il s'ensuit que $P_{(r-i)}$ est un polynôme homogène symétrique de degré un pour chacun des α_s.

$$P_{(r-i)} = K \sum \underbrace{\alpha_s \alpha_k \alpha_l \dots \alpha_t}_{r-i \text{ termes}}$$

Il reste à déterminer la constante K. Pour cela nous allons déterminer le terme diagonal dont la formation est unique dans les deux cas puisqu'il s'agit de former le terme de degré maximal décroissant pour chaque indice. Supposons pour commencer r-i > p.

Le terme diagonal sera :

$$\alpha_r^o \ \alpha_{r-1}^1 \ \dots \ \alpha_{r-i+1}^{i-1} \ \alpha_{r-i}^{i+1} \ \dots \ \alpha_{p-1}^{r-p} \ \alpha_{p+1}^{r-p+1} \ \dots \ \alpha_o^r \ .$$

Dans le produit $\Pi(\alpha_k - \alpha_l)$ on formera le terme correspondant :

---

(1) Cf. Aitken, Determinants and Matrices. Oliver and Boyds, Ed. London (p.115).

$$(-)^{r-1}\ \alpha_o^{r-1}\ \ (-)^{r-2}\ \alpha_1^{r-2}\ \ \ldots\ \ (-)^{r-p-1}\ \alpha_{p-1}^{r-p-1}\ \ (-)^{r-p}\ \alpha_{p+1}^{r-p}\ \ \ldots\ \ (-)^{i}\ \alpha_{r-i}^{i}\ \ (-)_{r-i}^{i-1}\ \alpha_{r-i+1}^{i-1}\ \ \ldots\ \ \alpha_r^o$$

Le résultat cherché s'obtient en multipliant ce terme par celui du bialternant égal à :

$$(-)^{r-1}\ (-)^{r-2}\ \ldots\ (-)^{o}\ \alpha_o\,\alpha_1\,\alpha_2\ \ldots\ \alpha_{p-1}\ \ \alpha_{p+1}\ \ldots\ \alpha_{r-i}$$

Si on suppose que $r-i < p$ le terme diagonal sera alors :

$$\alpha_r^o\ \ \alpha_{r-1}^1\ \ldots\ \alpha_{p+1}^{r-p-1}\ \alpha_{p-1}^{r-p}\ \ldots\ \alpha_{r-i+1}^{i-2}\ \alpha_{r-i}^{i-1}\ \alpha_{r-i-1}^{i+1}\ \ldots\ \alpha_o^r .$$

Le terme correspondant du produit sera :

$$(-)^{r-1}\ \alpha_o^{r-1}\ \ldots\ (-)^{i}\ \alpha_{r-i-1}^{i}\ (-)^{i-1}\ \alpha_{r-i}^{i-1}\ \ldots\ (-)^{r-p}\ \alpha_{p-1}^{r-p}\ \ (-)^{r-p-1}\ \alpha_{p+1}^{r-p-1}\ \ldots\ \alpha_r^o$$

et le terme du bialternant correspondant :

$$(-)^{r-1}\ \ (-)^{r-2}\ \ldots\ \ (-)^{o}\ \alpha_o\,\alpha_1\,\alpha_2\ \ \ldots\ \alpha_{r-i-1}$$

La constante K vaut donc :

$$(-)^{r\frac{(r-1)}{2}}$$

et :

$$x_i = (-)^{r\frac{(r-1)}{2}-i}\left(\sum_{p=o}^{r}(-)^{p}\ u_p\ P_{r-i}\,(p)\ \prod_{\substack{k>l\\ k,l\neq p}}(\alpha_k-\alpha_l)\right)\Bigg/\prod_{\substack{k>l\\ k\neq l}}(\alpha_k-\alpha_l)$$

où $P_{r-i}\,(p)$ est un polynôme de degré $(r-i)$ formé à partir des nombres α_s (p exclus) chacun étant au degré un.

Le développement (IV-a) est ainsi entièrement déterminé.

TABLE DES MATIÈRES

Pages

INTRODUCTION 3

CHAPITRE I - DIFFUSION PARAMAGNETIQUE DES NEUTRONS 5

1 - Etats des ions magnétiques 5
2 - Formules générales de la diffusion paramagnétique des neutrons 6
3 - Evaluation des éléments de matrice de l'opérateur $\vec{P}$ 9
4 - Expression générale de la section efficace paramagnétique 18

CHAPITRE II - ETUDE DES IONS DE TERRES RARES 25

1 - Formule générale de la section efficace dans le cas des terres rares 26

a) Etat fondamental des ions de terres rares 26
b) Section efficace pour un ion de terre rare 27

2 - Application de la formule générale 28

a) Poudre cristalline dans le domaine paramagnétique avec ou sans champ cristallin 28
b) Cas des ions polarisés. Section efficace magnétique cohérente 55

CHAPITRE III - ETUDE DES IONS DU GROUPE DU FER 81

1 - Considérations générales sur les ions du groupe du fer 81
2 - Calcul des coefficients de la formule (1-68) dans le cas du groupe du fer .. 83
3 - Application au cas du chlorure ferreux anhydre 83

a) Calcul des termes radiaux 85
b) Calcul des sections efficaces 86

CHAPITRE IV - ETUDE DE LA LARGEUR DE RAIE 97

1 - Etude d'un corps paramagnétique où le champ cristallin est négligeable 97
2 - Etude d'un corps paramagnétique où le champ cristallin n'est pas négligeable 99

a) Formulation générale 99
b) Expression des seconds moments 104

CONCLUSIONS GENERALES 113

BIBLIOGRAPHIE 117

APPENDICE I 119

APPENDICE II 121

APPENDICE III 127

APPENDICE IV . Equivalences opératorielles 147

IMP. LOUIS-JEAN – GAP

Dépôt légal n°123 – 1962

DEUXIEME THESE

Propositions données par la Faculté

"LE SPECTRE D'ENERGIE DES SUPRACONDUCTEURS".

Vu et approuvé :
Paris, le 10 Novembre 1961
Le Doyen de la Faculté des Sciences,
M. ZAMANSKY

Vu
et Permis d'imprimer :
Le Recteur de l'Académie
de Paris,
Jean ROCHE